

Tartu Ülikool
Loodus- ja tehnoloogiateaduskond
Füüsika Instituut



Robert Aare

**Kõrges elektriväljas relakseeruva Cu atomistliku
nanoemitteri modelleerimine kineetilise Monte Carlo
ning lõplike elementide meetoditega**

Bakalaureusetöö

12 EAP

Juhendaja: PhD Vahur Zadin

Tartu 2016

Sisukord

Lühendid ja sümbolid.....	3
1 Sissejuhatus.....	4
1.1 Ülevaade probleemistikast.....	4
1.2 Töö eesmärgid.....	7
1.3 Autori panus.....	7
2 Teoreetiline ülevaade.....	8
2.1 Elektriväli nanodefekti ümber.....	8
2.2 Emissioonivoolud.....	9
2.3 Mehaaniline pinge.....	14
3 Mudel ja meetodika.....	17
3.1 Kasutatav tarkvara.....	17
3.2 Vase atomaarpinna dünaamika tarkvaras Kimocs.....	18
3.3 Lõplike elementide meetod.....	20
4 Simulatsioonitulemused ning arutelu.....	23
4.1 Pinna rekonstrueerimine.....	23
4.2 LEM-i lahend atomistlikus esituses.....	29
4.3 Meetodi täpsushinnang.....	30
4.4 Arvutustulemuste sõltuvus Kimocsi simulatsioonikasti suurusest.....	33
4.5 Arvutustulemuste sõltuvus emitteri algkõrgusest.....	36
4.6 Arvutustulemuste sõltuvus vasekristalli temperatuurist.....	37
4.7 Edasised tööd.....	39
4.8 Kokkuvõte.....	40
5 Viited.....	41
6 Tänu sõnad.....	45
Lihthitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja lõputöö üldsusele kättesaadavaks tegemiseks.....	46

Kõrges elektriväljas relakseeruva Cu atomistliku nanoemitteri modelleerimine kineetilise Monte Carlo ning lõplike elementide meetoditega

Levinud teooria kohaselt tekivad vasepindadel kõrges elektriväljas nanoskaalalised väljaemitterid. Väljaemitterite kohal on elektriväli lokaalselt võimendatud, mille tõttu elektriväljast tingitud efektid, eelkõige emissioonivoolud ning mehaanilised pinged emitteri struktuuris on võimendatud. Emitterite tõttu tekivad pinna lähedal elektrilised läbilöögid, mille tekkimise mehhanism pole selge. Emitterite käitumise uurimiseks on varem tehtud simulatsioone, mis põhinevad molekulaardünaamikal ning näitavad atomistliku väljaemitteri evolutsiooni, arvestades aatomite vastastikmõjude kõrval elektrivälja mõju. Nende eesmärgiks on jälgida emitteri relakseerumisega kaasnevaid efekte, et välja selgitada emitterites valitsevad tingimused, et jõuda lähemale läbilöögi protsessi lahtiseletamiseni. Käesolevas töös on pinna rekonstrueerimise abil üles ehitatud varasematest simulatsioonitarkvaradest märkimisväärselt suuremat täpsust võimaldav arvutus algoritm. Saadud tulemused näitavad elektrivälja tugevuse, struktuurisest pingete ning emissioonivoolude kvalitatiivset käitumist.

Vask, väljaemitter, elektrilised läbilöögid, atomistlikud pinnad, pinna rekonstruktsioon, kõrge elektriväli

P250 – Tahke aine: struktuur, termilised ja mehaanilised omadused, kristallograafia, *phase equilibria*

Modelling the relaxation of a Cu field emitter in a high electric field using combined kinetic Monte Carlo and finite element simulations

In high electric fields, nanoscopic field emitter growth is believed to occur on copper surfaces. The field emitters cause electrical breakdowns, the triggering mechanism of which is not yet fully understood. Previously, simulations based on molecular dynamics have been done in order to study the conditions within and around the emitter during the relaxation process, in order to be able to get closer to fully understanding and explaining the mechanism that causes the breakdowns. In this work an algorithm is introduced, that with clever reconstruction of the atomistic surface gives more accurate results than previous similar calculation methods. Based on the results obtained with this algorithm, the qualitative behaviour of emission currents, local electric field around the emitter and stresses within the emitter structure are shown.

Cu nanotips, field emission, electrical breakdown, atomistic surfaces, surface reconstruction, high electric fields

P250 – Condensed matter: structure, thermal and mechanical properties, crystallography, *phase equilibria*

Lühendid ja sümbolid

CLIC – *Compact Linear Collider* – Kompaktne lineaarne osakestepõrguti

LHC – *Large Hadron Collider* – Suur hadronite põrguti

LEM – Lõplike elementide meetod

Kimocs – *Kinetic Monte Carlo for Surfaces* – Kineetiline Monte Carlo pindadele

MD – Molekulaardünaamika

KMC – *Kinetic Monte Carlo* – Kineetiline Monte Carlo

NEB – *Nudged Elastic Band* teooria

CEM – *Corrected Effective Medium* teooria

Fcc – *Face-Centred Cubic*

GTF – *General Thermal Field equation* – Üldine emissioonivoole kirjeldav mudel

FN – Fowler-Nordheim

RLD – Richardson-Laue-Dushman

WKB - Wentzel-Kramers-Brillouin

1 Sissejuhatus

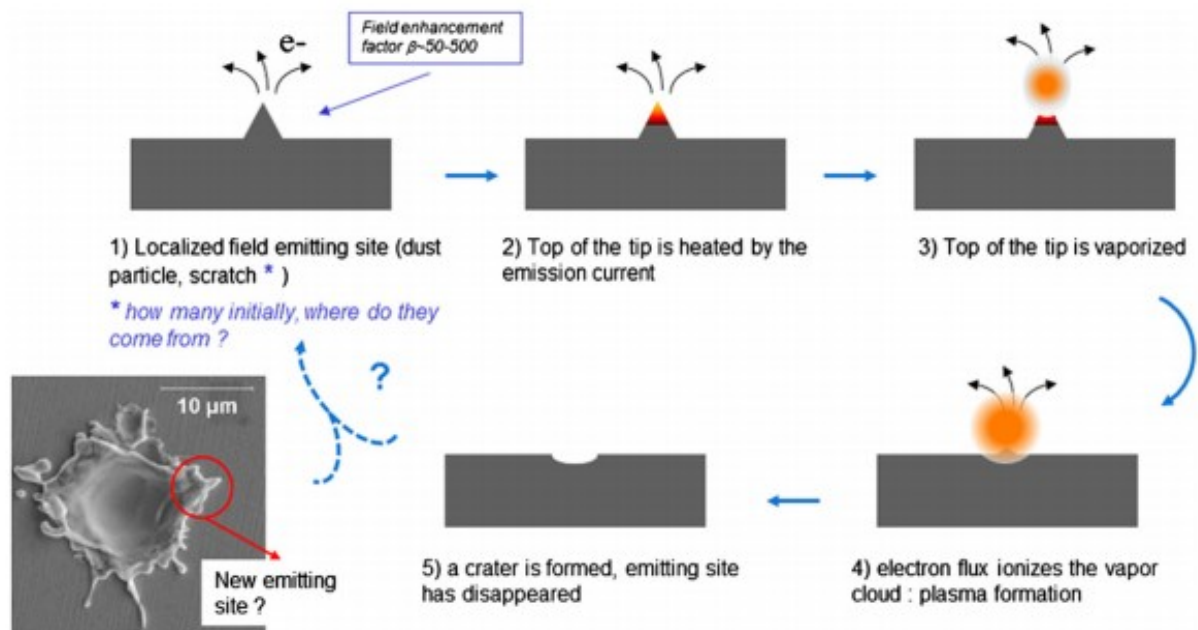
1.1 Ülevaade problemaatikast

CLIC ehk *Compact Linear Collider* on CERN-i ehitada plaanitav lineaarne osakestekiirendi, millega soovitakse jõuda seni saavutamata energiatasemetele elektronide ning positronide kokkupõrgetes. [1]. CLIC-i eesmärgina nähakse kuni 3 TeV energiaga kokkupõrgete vahemiku uurimist, täiendamaks tuntud LHC eksperimendist saadavaid teadmisi CLIC-i suurema täpsusega tulemustega [2]. CLIC-i lineaarsusest, pikkuspiirangutest (50 km) ning kokkupõrgete sihtenergiast tingitult kasutatakse kiirendavaid raadiosageduslikke elektrivälju suurusjärgus 100 MV/m sageduse 12 GHz juures, mis on ligikaudu 20 korda suurem LHC-s kasutatavast kiirendavast elektriväljast [1-4]. Kiirendi sisepinna lähedane elektriväli on seejuures ~ 200 MV/m [5].

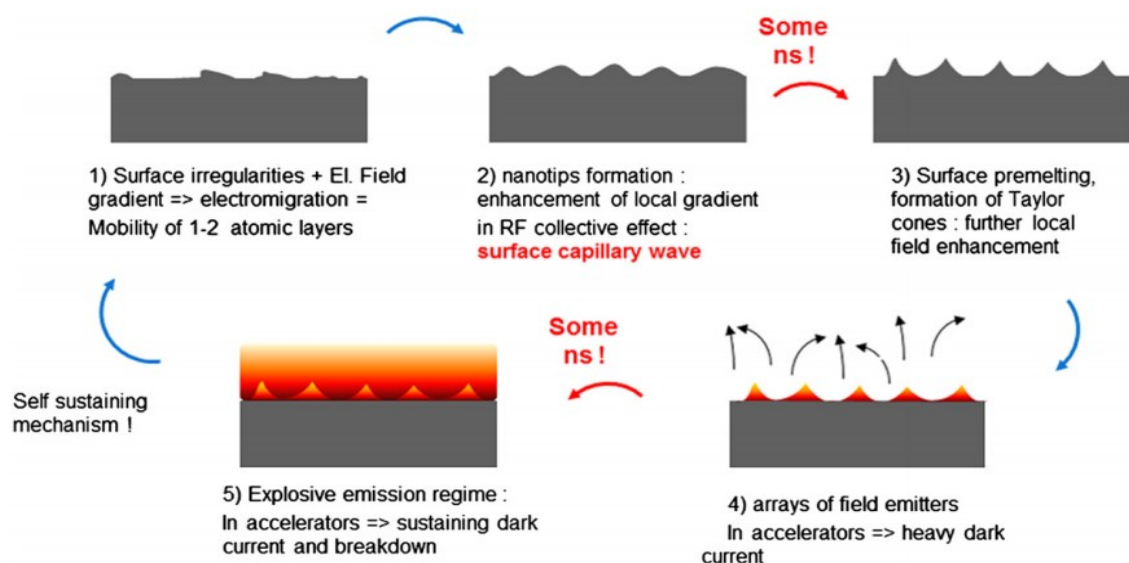
Kõrge kiirendava elektriväljaga kaasnevad kiirendi sisepindadel **elektrilised läbilöögid**, mille esinemissagedus on võrdeline kiirendava elektrivälja tugevuse 30-nda astmega, osakesteimpulsi kestuse 5-nda astmega [6] ning mis põhjustavad kadusid osakestekiire kirkuses. Soovitav osakesteimpulsi pikkus on 240 ns, millega kaasnev soovitav läbilöögisagedus peaks jääma alla $3 \cdot 10^{-7}$ läbilöögi impulsi kohta meetris [3]. Elektriliste läbilöökidega kaasnevad ühtlasi ka tugevad **pinnakahjustused** kiirendi komponentide sisekülgedel [4]. Läbilöökide esinemissagedus on põhiline kiirendava elektrivälja tugevust piirav faktor [3]. Läbilöökide arvu vähendamiseks ning piiramiseks on seetõttu oluline mõista nende tekkimise põhjuseid. **Läbilöökide tekkepõhjust ei osata veel täielikult seletada.**

Klassikaliselt loetakse vaakumläbilöökide üheks võimalikuks tekkepõhjuseks pinna esiletungivaid **nanodefekte** [7] või nende kombinatsioone [8]. Defekti ümber on lokaalne elektriväli kuni 100 [7,8] korda võimendatud, sõltuvalt defekti kujust. Elektrivälja mõjul on elektronidel tõenäosus tunnelleeruda metalli pinnast välja [8]. Välja poolt indutseeritud elektronide emiteerumine päädib elektrivooluga [8], mis soojendab defekti Joule-Lenzi efekti kaudu [9], mille tagajärjel defekt hakkab sulama ning seejärel aurustuma [4]. Seejärel ioniseerivad elektronid aurustunud vaseatomid ning tekib lokaalne plasmapiilv [3]. Plasmapiilve tekkega võib voolutugevus tõusta 1 ns jooksul sadade amprite suurusjärku [3,7]. Aurustumise tulemusena jääb nanodefektist alles kraater, mille serv võib olla uue läbilöögi tekke alguspunktiks [4]. Protsessi skeem on kujutatud joonisel 1.

On spekulieritud, et täiendava mehhanismi järgi hakkavad väikesed pinnadefektid elektrivälja toimet kasvama [10], tekitades **nanomõõtmelisi teravikke** [4], mille ümber elektriväli pidevalt võimendub. Seeläbi tekib kogum elektronemissiooni lähtepunkte. Elektronemissiooni tulemusena esineb emitteri piirkonnas pinna sulamisele viitavaid tunnuseid [4,10], mida on eksperimentaalselt täheldatud näiteks CLIC-i komponentide testimisel [10]. Elektrivälja olemasolul on protsess iseend taastekitav [4]. Täiendava mehhanismi teooriat kirjeldav skeem on joonisel 2.



Joonis 1: Elektrilise läbilöögi klassikaline tekkeskeem [4]. 1) Lokaliseeritud elektronide emissiooni lähtepunkt. 2) Emissioonivoolud soojendavad emitteri tippu. 3) Emitteri tipp aurustub. 4) Elektronide vool ioniseerib aurustunud vaseatomid; tekib plasma. 5) Emitterist jääb järgi kraater.



Joonis 2: Allikas [4] välja pakutud läbilöögi protsessi täiendava mehhanismi skeem.

- 1) Pinnadefektid ning rakendatud elektriväli tingivad elektromigratsiooni ning pinna muutumise.
- 2) Tekivad nanomõõtmelised teravikud.
- 3) Teravikud hakkavad sulama, tekivad Tayloriga koonused. Väljavõimendus tugevneb.
- 4) Tekib jada väljaemittereid. 5) Läbilöögid.

Eksperimentaalselt on läbilöökide jälgimine keeruline, kuna läbilöögi protsess toimub nanosekundite vältel [4], lõppedes emitteri hävimisega läbilöögis. Selle tulemusena tekkiv üksiku kahjustuse pindala on suurusjärguliselt vahemikus $10^{-10} - 10^{-8} \text{ m}^2$ [11]. Emissioonivoolu kirjeldava Fowler-Nordheimi mudeli järgi on emissioonivoolude emitterite pindalad kuni kümme suurusjärku väiksemad [12]. Elektriliste läbilöökide mõistmisel on kõige olulisemaks probleemiks jäänud joonisel 1 kujutatud nanoskaalaliste väljaemitterite tekkepõhjustest arusaamine. Kuna **eksperimentaalselt läbilöögi protsesse näha ei ole õnnestunud**, on nende simuleerimiseks välja töötatud erinevaid simulatsioonitarkvarasid ning erinevaid uurimismetodeid.

Atomistlikust pinnast lähtudes on üks uurimise aluseid molekulaardünaamika (MD). Varasemate MD simulatsioonidega on jõutud järeldusele, et **elektrivälja mõju vasekristalli pinnale, mille all on tühi, võib viia nanoemitterite moodustumiseni** [13]. Samuti on näidatud, et nanoemitteri stabiilsus sõltub emitteri mõõtmetest ning sellele mõjuvatest termilistest efektidest [14]. Lõplike elementide meetodit (LEM) MD simulatsiooniga kombineerides on uuritud pinna modifitseerumist plastsete deformatsioonide tõttu [15-16]. Võimalik kõrge elektriväljas oleva pinna spontaanset muutumist seletav mehhanism leiti artiklis [17]. Emitterist lähtuvaid emissioonivoolu ning nende termilisi efekte on uuritud artiklis [9]. Nanoemitterite dünaamikat on uuritud, üritades seletada eksperimentaalselt nähtavate emitterite puudumist kujumälu efektiga [18]. Võimaliku volframist nanoemitteri teket kõrge elektrivälja ning femtosekundilise lasertöötuse mõjul on näidatud artiklis [19].

Molekulaardünaamikaga mõistlike arvutusaegade saamiseks on vaja rakendatud elektrivälja tugevalt üle skaleerida [13-14,20], mis muudab simulatsioonitulemuste võrdluse eksperimentaalsete tulemustega keeruliseks. Seetõttu kasutatakse MD tulemuste ning eksperimentaalsete tulemuste ühendamiseks lõplike elementide või lõplike vahede meetoditel põhinevaid arvutusprogramme.

Üheks vasespinna nanoemitterite dünaamika simuleerimise tarkvaraks on **HELMOD**. HELMOD (*Hybrid Electrodynamics - Molecular Dynamics*) on Helsingis välja töötatud mudel, mis lisab atomistliku pinna dünaamikale elektrodünaamikast tulenevad mõjud. HELMOD võimaldab arvutada väljavõimendust atomistliku pinna kohal ning elektrivälja mõjul tekkivat pindlaengu jaotust, arvestades samaaegselt aatomite vastastikmõjusid kristallis [21]. HELMOD arvutab elektrivälja lõplike vahede meetodiga, lähtudes Laplace'i vörrandist [21].

HELMOD eeldab samas fikseeritud atomistliku pinna kristallstruktuuri orientatsiooni. Samuti eeldab lõplike vahede meetod HELMOD-is atomistliku lahutusvõimega risttahukalist ruumilist diskretiseerimist, mistõttu on elektrivälja lahend emitteri tipu ümbruses ning muudes **suure kumeruse või nõgususega piirkondades ebatäpne**. Kuna läbilöökide tekkes võivad olulist rolli mängida väga väikesed pinnamuutused, on vaja luua täpsem meetod kui HELMOD.

1.2 Töö eesmärgid

- Töötada välja simulatsioonitarkvara, mis kasutab LEM-arvutust *Kimocsi* poolt genereeritud pindadele, et uurida nanoskoopilise vase pinnadefekti arengut kõrges elektriväljas ning arvutada selle käigus lokaalsed elektriväljad, mehaanilised pinged defektis ning emissioonivoolud. Muuta süsteem lihtsalt täiendatavaks ning mugavaks kasutada.
- Luua meetod atomistliku pinna rekonstrueerimiseks pidevaks pinnaks, et rakendada LEM-metoodikat.
- Võrrelda kirjutatud simulatsioonitarkvara tulemusi HELMOD-iga.
- Analüüsida pinnadefekti evolutsiooni käigus elektrivälja, materjalisest mehaanilise pinge ning emissioonivoolude käitumist.

1.3 Autori panus

COMSOL-i vasepinna nanodefekti mudel pärineb PhD Vahur Zadinilt, millele lisas GTF-mudeli täienduse Kristjan Eimre. Tarkvara *Kimocs*, mis implementeerib atomistliku pinna defekti mudelit, kirjutas PhD Ville Jansson Helsingi ülikoolist. Käesoleva töö autor kirjutas mainitud COMSOL-i mudelit ning tarkvara *Kimocsi* kombineeriva algoritmikogumi *Femocs*, mis hõlmas algelisi pinna rekonstrueerimisalgoritme.

Käesolevas töös on kõik arvutused, graafikud, pildid ning kirjutatu tehtud autori poolt, välja arvatud joonised 1, 2 ning 4.

2 Teoreetiline ülevaade

2.1 Elektrivälja nanodefekti ümber

Elektrivälja arvutamise aluseks on Gaussi seadus. Kui ruumlaeng lugeda nulliks, **taandub Gaussi seadus Laplace'i võrrandi lahendamiseks**.

Ruumlaengu jaotust simuleeritava pinna kohal ei arvestata, kuna selle eeldatav mõju on väike võrreldes muude ebatäpsust põhjustavate faktoritega [21]. Järelikult:

$$\nabla^2 V = 0 \quad (1)$$

Saadavast elektrostaatilise potentsiaalist V saab arvutada elektrivälja vektori potentsiaalivälja negatiivse gradiendina [22-23]:

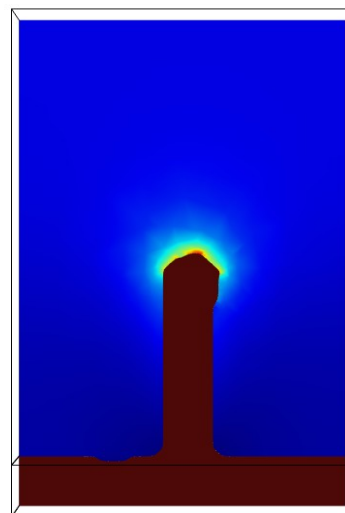
$$\mathbf{E} = -\nabla V \quad (2)$$

Laplace'i võrrandi lahendamiseks on vaja määrata 3 ääritingimust:

- Vasepind on määratud ekvipotentsiaalpinna potentsiaaliga 0.
- Simuleeritava kasti ülemisele tahule on määratud simuleeritud süsteemile rakendatud elektrivälja tugevus.

Simulatsioonikasti külgedele on rakendatud isoleeriv ääritingimus (normaalisuunaline elektriväli on võrdne nulliga).

Tasapinnalise materjali puhul oleks uuritavas ruumipiirkonnas homogeenne elektriväli. Pinnadefekti olemasolu viib lokaalse pinnalähedase elektrivälja muutuse tekkeni. Seejuures pinnast eemaldudes, piisava kauguseni jõudes, elektrivälja tugevus ühtlustub. **Defekti ümbruses võimendub elektriväli, sõltuvalt defekti kujust [23], kuni 2 suurusjärgu ulatuses [7].** Sellest tulenevalt on elektrivälja võimendustegur, tähisega β_E , defineeritud kui teraviku tipu vahetus läheduses oleva elektrivälja tugevuse väärtuse ning defektist kaugel oleva keskmise elektrivälja väärtuse suhe [7].



Joonis 3: Elektrivälja jaotus pinnadefekti ümber. Värvus märgib elektrivälja tugevust.

$$\beta_E = \frac{E_{tipp}}{E_{keskmine}} \quad (3)$$

2.2 Emissioonivoolud

2.2.1 Fowler-Nordheimi mudel

Elektronide emiteerumine pinnast on oma olemuselt kvantmehhaaniline tunnelleerumine läbi potentsiaalibarjääri. Siinsel juhul elektronide tunnelleerumine metalli pinnast välja, tekitades elektrivoolu [24]. Elektrivälja poolt indutseeritud elektronide emiteerumise puhul kasutatakse protsessi kirjeldamiseks Fowler-Nordheimi võrrandit või tema modifitseeritud kujusid [9,15,25]. Fowler-Nordheimi võrrand üldkujul on järgnev [6,26]:

$$J = \frac{a \beta^2 E^2}{\varphi t^2(y)} e^{\frac{-b \varphi^{3/2}}{\beta E} v(y)} \quad (4)$$

- E - rakendatud elektrivälja tugevus (V/m)
- J - emissioonivoolu tihedus (A/m²)
- β - eelpool defineeritud väljavõimendustegur
- $\varphi=4.5$ eV on elektroni väljumistöö vasepinnast [27]
- a ja b - Fowler-Nordheimi vastavalt esimene ja teine konstant:

$$a = 1.541434 \cdot 10^{-6} \text{ A } \frac{\text{eV}}{\text{V}^2}; b = 6.830890 \text{ eV}^{-\frac{3}{2}} \frac{\text{V}}{\text{nm}} \quad (5)$$

- Eksponendi parandusteguri $v(y)$ saab lähendada:

$$v(y) \approx 1 - y^2 + \frac{y^2}{3} \ln(y) \quad (6)$$

- y on Nordheimi parameeter, defineeritud kui

$$y = c \sqrt{\beta E} / h \quad (7)$$

- kus konstant c on:

$$c \equiv 1.199985 \frac{\text{eV}}{\sqrt{\text{V nm}}} \quad (8)$$

- ning

$$t(y) = v - \frac{2}{3} y \frac{dv}{dy} \quad (9)$$

Faktiliselt on ainus Fowler-Nordheimi emissioonivoolu kontrolliv parameeter lisaks elektriväljale pinnageomeetria, mille osa väljendab välja võimendustegur.

2.2.2 Elektronide termoemissioon

Fowler-Nordheimi võrrand eeldab süsteemi temperatuuriga 0 K. Temperatuuri tõustes tuleb lisada parandustegurid [9,28]. Temperatuuri tõustes lisandub, ehkki suurusjärke madalama voolutihedusega, klassikalisele Fowler-Nordheimi emissioonivoolule soojuslik elektronemissioon [27]. Viimane on oluline, kuna elektronide termoemissioon toimub oluliselt suuremalt pindalalt [27]. Termilist elektronemissiooni kirjeldab Richardson-Laue-Dushmani võrrand [29], siinsel juhul Schottky potentsiaalibarjääri mudelit arvestades [9,30]:

$$J = A_{RLD} \cdot T^2 \cdot e^{\left(\frac{-\varphi_{Bn}}{V_t}\right)} \quad (10)$$

A_{RLD} on Richardsoni konstant [29]:

$$A_{RLD} = \frac{4 \pi m k^2 q}{h^3} \simeq 120 \frac{A}{cm^2 K^2} \quad (11)$$

$$V_t = \frac{kT}{q} \quad (12)$$

T on absoluutne temperatuur, k on Boltzmanni konstant ning q elementaarlaeng. Schottky efekti ehk elektrivälja mõjul pinna potentsiaalibarjääri langemist arvestades [30]:

$$\varphi_{Bn} = \varphi_{B0} - \sqrt{\frac{q^3 E}{4 \pi \epsilon_0}} \quad (13)$$

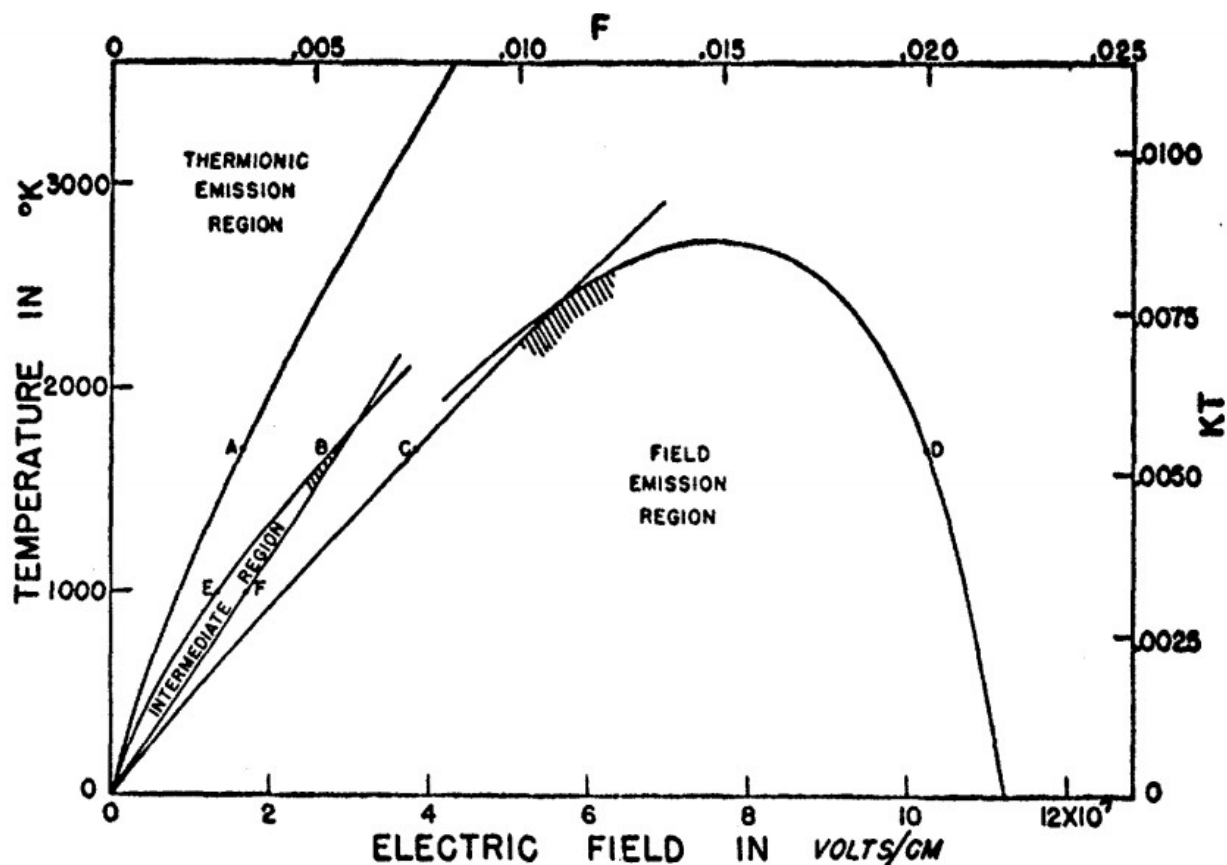
E on lokaalse elektrivälja tugevus, ϵ on vaakumi dielektriline konstant. φ_{B0} on elektroni väljumistöö vasepinnast [9,29-30].

2.2.3 Nottinghami efekt

Elektronide emissiooni käigus toimub energiaülekanne emiteeruvate elektronide ja pinna vahel [31]. Selle tulemusena võib pind nii soojeneda kui jahtuda, olenevalt sellest, kas emiteeritud elektronide energiad on vastavalt väiksemad või suuremad kui Fermi energia. Sellist nähtust nimetatakse Nottinghami efektiks [27,31]. Kui pinnast emiteeruva elektroni energia on alla Fermi energia, siis teda pinnale asendama tulev elektron on esialgu Fermi energiatasemel, mistõttu osa selle energiast läheb ümbritsevale keskkonnale ning esineb lokaalne soojenemine. Analoogselt toimub jahtumine juhul, kui lahkuva elektroni energia on üle Fermi energia, tingides asendava elektroni jaoks keskkonnast energia neelamise [27,31].

2.2.4 Emissioonivoolude mudelite kasutuspiirkonnad ning GTF mudel

Kuigi tegelikud emissioonivoolude voolutihedused sõltuvad nii temperatuurist kui ka lokaalse elektrivälja tugevusest, ei kirjelda ei termoemissiooni mudel ega Fowler-Nordheimi mudel emissioonivoolu tihedust kõigis parameetripiirkondades täpselt [9,24,28]. Väga kõrgete elektriväljade ning väga madala temperatuuri puhul kirjeldab emissioonivoolu paremini Fowler-Nordheimi mudel, vastupidisel juhul aga Richardson-Laue-Dushmani termoemissiooni mudel [9,28-29].



Joonis 4: Emissioonivoolude voolutiheduste mudelite kasutatavus piirkonniti, sõltuvalt kohalikust elektriväljast ning emitteri temperatuurist. Field Emission regiooni kirjeldab hästi Fowler-Nordheimi mudel, Thermionic Emission regiooni termoemissiooni mudel. Vahepealses regioonis (Intermediate Region) on mõlemad mõnevõrra ebatäpsed [28].

Arvestamaks korrektsemalt emissioonivoolude voolutihedust, saab kombineerida Fowler-Nordheimi ning Richardson-Laue-Dushmani mudelid kokku **üldiseks emissioonivoolu mudeliks, tuntud kui General Thermal Field equation (GTF)** [9,24]. Viimane kirjeldab emissioonivoolude voolutihedust ka mudelite üleminekupiirkonnas [9]. Selle järgi avaldub voolutihedus järgmiselt [9,24]:

$$J_{GTF}(F, T) = A_{RLD} T^2 N\left(\frac{\beta_T}{\beta_F}, \beta_F(E_0 - \mu)\right) \quad (14)$$

Kus:

$$N(n, s) \approx n^2 \sum \left(\frac{1}{n}\right) e^{-s} + \sum (n) e^{-ns} \quad (15)$$

β_F ning β_T on energia tõusufaktorid vastavalt välja- ning termoemissioonivoolude jaoks [9,24]:

$$\beta_F(E_m) = \frac{-\delta}{\delta E} \theta(E_m) \quad (16)$$

$$\beta_T = \frac{1}{k_B T} \quad (17)$$

μ on Fermi energia [24]. E_m on maksimaalne emiteeruvate elektronide energia, kusjuures:

$$n = \frac{\beta_T}{\beta_F} \quad (18)$$

E_0 on energiaparameter:

$$E_0 = E_m - \theta \frac{(E_m)}{\frac{\delta}{\delta E} \theta(E_m)} = E_m + \frac{\theta(E_m)}{\beta_F(E_m)} \quad (19)$$

$\theta(E)$ on kvanttunnelleerumise kirjeldamisel kasutatav Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) faktor, defineeritud järgmiselt:

$$\theta(E) \equiv 4\pi \frac{\sqrt{2m}}{h} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{V(x) - E} dx \quad (20)$$

x_0 ning x_1 on nullkohad ning eelmainitud E_m integrandi maksimum [9,24]. Parand, mis toodud lähendust kasutades võimaldab Fowler-Nordheimi võrrandis temperatuurist tingitud parandustegurite arvutamist vältida, avaldub summana [9,24]:

$$\sum(x) \approx \frac{1}{1-x} - x(1+x) + \frac{1}{4} x^3 (7x-3) + \zeta(2) x^2 (1-x^2) \quad (21)$$

$\zeta(2)$ on Riemanni zeeta-funktsioon.

Kuna vase makroskoopiline sulamistemperatuur on 1358 K [32], on simulatsioonides esinevad temperatuurid piiratud temperatuurini 1400 K. Sellele lisaks on võimendatud elektrivälja tugevus piiratud suuruseni 12 GV/m, kuna eeldatav läbilööki põhjustav elektrivälja suurus on ca 10-12 GV/m [33]. Emissioonivoolude arvutamiseks on Eimre *et al.* poolt implementeeritud GTF mudel COMSOL-is, mis hõlmab endas elektronide termo- ja väljaemissiooni ning Nottinghami efekti.

2.2.5 Elektrivool vasekristallis

Elektrivoolude arvutamine põhineb laengu jäävusel ning diferentsiaalsel Ohmi seadusel [22]:

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla \varphi_c) = 0 \quad (22)$$

Sellele võrrandile vastab mudelis järgnev ääritingimus, mis seab voolud võrdseks GTF-mudeli arvutatud vooludega:

$$J = \sigma E = \sigma \nabla \varphi_c = J_{GTF}(E, T) \quad (23)$$

Emissioonivoolu allikaks on selles mudelis määratud vase-vaakumi piirpind ning arvutatakse pinnanormaali sihis pinnast välja liikuvat elektrivoolu tihedust. Sarnaselt elektrivälja arvutamise juhuga on süsteem külgede suhtes elektriliselt isoleeritud ehk kehtib järgnev tingimus [22]:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (24)$$

Siinsel juhul on \mathbf{n} simulatsioonikasti külgtahkude pinnanormaal.

Metallisiseks nullpotentsiaaliks on määratud uuritava vasekristalli alumine külg. Elektriline potentsiaal vaakumis ning metalli osas on mudelis defineeritud üksteisest sõltumatute suurusena nende segamini ajamise vältimiseks. Seetõttu on metallidomeenis eelkirjeldatud vaakumiosas defineeritud potentsiaal $V_{\text{vaakum}} = V_2 = 0$. Mudelis on arvestatud vase elektrijuhtivuse muutumisega sõltuvalt nanoskaalaefektidest ning temperatuurist. Vase elektrijuhtivus on määratud isotroopseks.

2.2.6 Soojusjuhtivus isotroopses vasekristallis

Emissioonivooludega kaasneb emitteri soojenemine. Joule'i soojenemist saab kirjeldada järgmiselt [22]:

$$Q = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} \quad (25)$$

Siin on Q soojushulk (J), mis antakse emitterisse. Sekundaarne temperatuuri tõusmise põhjus on eelkirjeldatud Nottinghami efekt. Temperatuuri kasvades tõuseb vase takistus, tingides soojenemise intensiivistumise [31].

Emissioonivoolude lähtepiirkonda kogunenud soojushulk levib vasekristallis edasi, kuna vask on võrdlemisi hea soojusjuht. Soojuse levikut vasekristallis kirjeldab järgmine võrrand [22]:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q \quad (26)$$

- ρ - vase tihedus (kg/m³)
- C_p - vase soojusmahtuvus (J/kg)
- k - soojusjuhtivus (W/ m K)
- Q - soojusallikas

Soojusjuhtivusvõrrandi lahendamiseks on uuritav vase monokristall mudelis soojuslikult isoleeritud nii külgmiste tahkude kui vase-vaakumi piirpinna juures. Vasekristalli alumisele tahule on määratud kristalli algtemperatuur. Soojusallikaid on määratud kaks: vasepind, arvestamaks Nottinghami

efektist tulenevat soojuslikku mõju, ning kogu vasekristall, arvestamaks Joule'i soojenemist.

2.2.7 Nanomõõtmelisusest tulenevad parandid elektri- ning soojusjuhtivusteguritele

Defekti pindala ning ruumala suhe mõjutab materjali omadusi [9]. Vasepinna nanodefekti puhul toimub suurem osa elektronide emissioonist suhteliselt väikeselt pindalalt, seeläbi suurendades elektrilist takistust ning vähendades soojusjuhtivust [9]. Pindala ning ruumala mõju suuruse hindamiseks saab kasutada Knudseni arvu, mis on defineeritud kui [9]:

$$Kn = \frac{\lambda}{d} \quad (27)$$

λ on elektronide keskmine vaba tee pikkus ning d on nanotraadi läbimõõt [9]. GTF-mudelil võetakse nanotraadi läbimõõdu asemele defekti keskmine läbimõõt.

Materjali klassikalised omadused kehtivad, kui $Kn \ll 1$ ning nanoskaalalisusest tulenevat parandit tuleb arvestada, kui $Kn \geq 1$ [10]. Sel juhul on elektri- ja soojusjuhtivus järgmine:

$$\sigma = F(Kn) \cdot \sigma_0 \quad (28)$$

Siin on σ_0 klassikaline elektri- ja soojusjuhtivus. Soojusjuhtivus avaldub:

$$\kappa = F(Kn) \cdot \kappa_0 \quad (29)$$

Siin on κ_0 klassikaline soojusjuhtivus [9]. $F(Kn)$ on kordaja, mille saab materjalist [34].

2.3 Mehaaniline pinge

2.3.1 Elektrivälja ning pinna vastastikmõju

Gaussi seadusest tulenevalt on elektri- ja soojusjuhtivusteguritele pinnal välise elektrivälja mõjul pindlaengutihedus [13,23,35]:

$$\sigma_{\text{kohalik}} = \epsilon_0 |\mathbf{E}| \quad (30)$$

\mathbf{E} on pinna normaalisuunaline elektrivälja pinna kohal ning ϵ_0 on dielektriline konstant vaakumis. Laengu paiknemise pinnal saab väljendada kui $dq = \sigma dA$, kus dA on diferentsiaalne pindala. Selle kaudu saab avaldada igas punktis pinnale mõjuva Lorentzi jõu kujul [13,23,35]:

$$dF_{\text{Lorentz}} = \sigma \mathbf{E} dA \quad (31)$$

Jõud on avaldatud lokaalselt, kuna elektrivälja tugevus pinna kohal ei ole käsitletavatel pindadel homogeenne [13]. Sellest tulenevalt ei ole pinnale mõjuv jõud samuti ühtlane. Geomeetria keerulisust arvesse võttes on arvutuslikult lihtsam kasutada Maxwelli pingetensorit, mis annab tulemusena rõhu [35]:

$$T_{ij} = \epsilon_0 \left(E_i E_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} E^2 \right) + \frac{1}{\mu_0} \left(B_i B_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} B^2 \right) \quad (32)$$

Käsitletavas mudelis saab eeldada, et magnetvälja mõju on tühine, mistõttu kaob pingetensori üldkujust magnetinduksiooni \mathbf{B} sisaldav liige ning arvutatava võrrandi saab ülaltoodud mõttekäiku arvestades lihtsustada järgnevale kujule [35]:

$$\mathbf{F}_{EF} = \frac{\epsilon_0}{2} E^2 A \mathbf{n} \quad (33)$$

E on siinsel juhul pinna kohal olev normaalisuunaline elektriväljavektori moodul, \mathbf{n} on pinnanormaal, \mathbf{F} on punktis pinnale mõjuv jõud ning A on käsitletava pinnaühiku pindala [35].

2.3.2 Efektiivne mehaaniline pinge

Efektiivne mehaaniline pinge on defineeritud Von Misesi kriteeriumi kaudu. Von Misesi pinge on skalaarne ning koordinaatsüsteemi valikust sõltumatu suurus, mis kombineerib kõik pingetensori komponendid. Nende omaduste tõttu on see mugav suurus materjalis tekkiva mehaanilise pinge hindamiseks. Von Misesi pinge saab lahti kirjutada järgnevalt, eeldades et s_{ij} on Cauchy stressitensori komponendid [36]:

$$s_{Mises} = \sqrt{\frac{3}{2} \left(s_{ij} - \frac{(\text{trace}(s))}{3} \delta_{ij} \right) \cdot \left(s_{ij} - \frac{(\text{trace}(s))}{3} \delta_{ij} \right)} \quad (34)$$

Kui efektiivne pinge materjalis on kriitilisest piirpingest väiksem, deformeerub materjal elastselt. Kui efektiivne pinge on võrdne kriitilise pingega, deformeerub materjal plastselt. Kriitilisest suurem pinge pole võimalik, kuna see tähendaks lõpmatult plastset deformatsiooni. Kriitiline pinge sõltub materjalist. Emitteris põhjustab pingeid ning deformatsioone pinnale mõjuv jõud. Deformatsiooni kirjeldamisel seab järgnev seos sõltuvusse esialgse geomeetria (X) ning lõppgeomeetria (x) [36-37]:

$$dx = F dX \quad (35)$$

Suurus F on selles seoses deformatsioonigradient, mis sisaldab kogu informatsiooni materjali kohalike sisedeformatsioonide suhtes [37]. Tegemist on 2. järku tensoriga [36-37]. Sellest saame vastava Green-Lagrange deformatsioonitensori [36-37]:

$$\epsilon = \frac{1}{2}(C - I) = \frac{1}{2}(F^T F - I) \quad (36)$$

$C = F^T F$ on paremakäeline Cauchy-Green'i tensor ning I ühiktensor [37]. Käsitleme siinjuhul vasekristalli kui isotroopset lineaarselt elastset materjali, mistõttu saame avaldada Hooke'i seaduse kujul [36-38]:

$$S = C_e : \epsilon_{el} = C_e : (\epsilon - \epsilon_0 - \epsilon_{th}) \quad (37)$$

C_e on elastsustensor ning $\epsilon_{el} = \epsilon - \epsilon_0 - \epsilon_{th}$ elastsete deformatsioonide tensor, mille saab kogu deformatsioonide hulgast esialgsete ning mitte-elastsete deformatsioonide mahalahutamisel [37]. S on teine Piola-Kirchhoffi pinge, mida kasutame suuri deformatsioone eeldades [36-38]. Esimest (P) ja teist Piola-Kirchhoffi (S) pinget ning Cauchy pinget (s) ühendavad järgnevad seosed [36-37]:

$$S = F^{-1} P \quad s = J^{-1} P F^T \quad J = \det(F) \quad (38)$$

Cauchy pinge on defineeritud jõu ning selle jõu poolt deformeeritud materjali pindala jagatisena ning on matemaatilises käsitluses sümmeetriline tensor [36]. Selle kaudu on seotud elektrivälja poolt süsteemile avaldatav rõhk ning materjalis tekkivate pingete avaldised [37]. Rõhku kirjeldatakse tensoralgebraliseult järgnevalt [37]:

$$p = -\frac{1}{3} \text{trace}(s) = \frac{-s_{kk}}{3} \quad (39)$$

Viimane seos vastab ruumalalisele Cauchy pingele materjalis (*Volumetric stress*) [37], mis on defineeritud kui materjali ruumala muut deformeerumisel jagatuna esialgselt hõivatud ruumalaga:

$$p = -\frac{1}{3} \text{trace}(s) = \frac{\Delta V}{V_0} \quad (40)$$

Nihkepingele ehk pingele materjalis ruumala muutust arvestamata (*Deviatoric stress*) vastab seos [36-38]:

$$s_d = s + pI \quad (41)$$

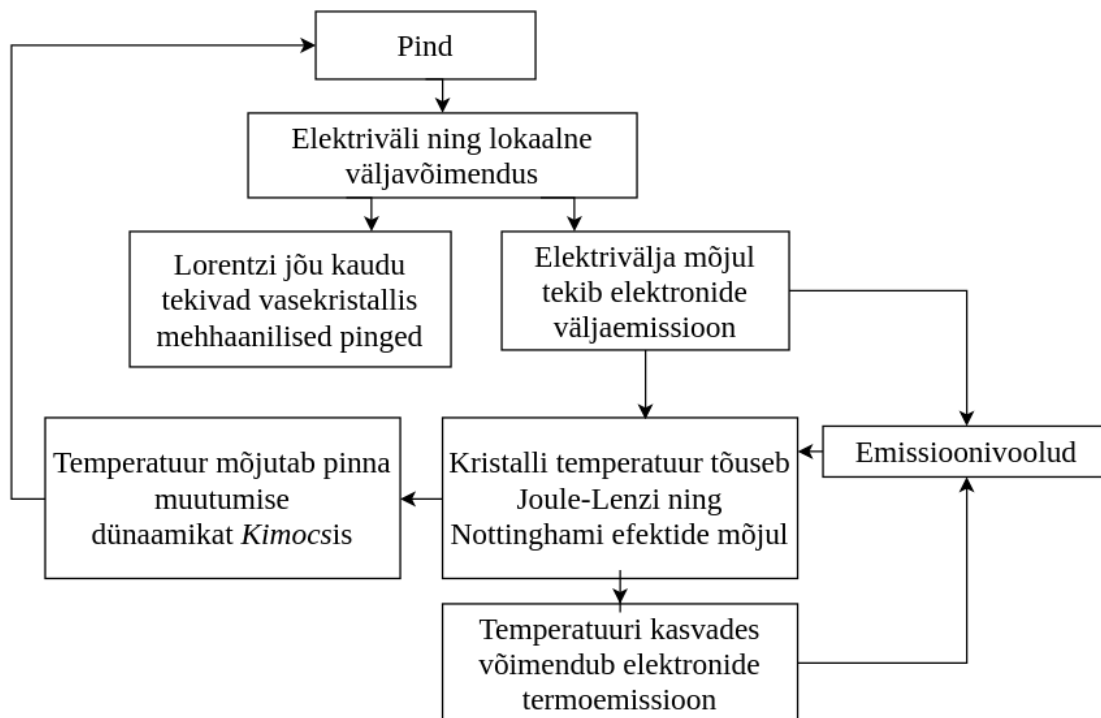
Nihkepinge teine invariant avaldub järgnevalt [36-37]:

$$J_2(s) = \frac{1}{2} s_d : s_d \quad (42)$$

Selle kaudu avaldub von Misesi pinge ehk materjalis mõjuv efektiivne pinge [36-37]:

$$s_{Mises} = \sqrt{3 J_2(s)} \quad (43)$$

Käsitletavas mudelis on vasekristall pinge suhtes isotroopseks määratud, Youngi mooduliga 110 GPa, Poissoni suhtega 0.35 ning tihedusega $8700 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ [39]. Vasepind loetakse statsionaarseks ning vasedomeeni põhi on fikseeritud. Simulatsioonikasti külgtahkudele on määratud sümmeetria rajatingimused. See tähendab, et uuritav vase monokristall on välistest pingetest isoleeritud.



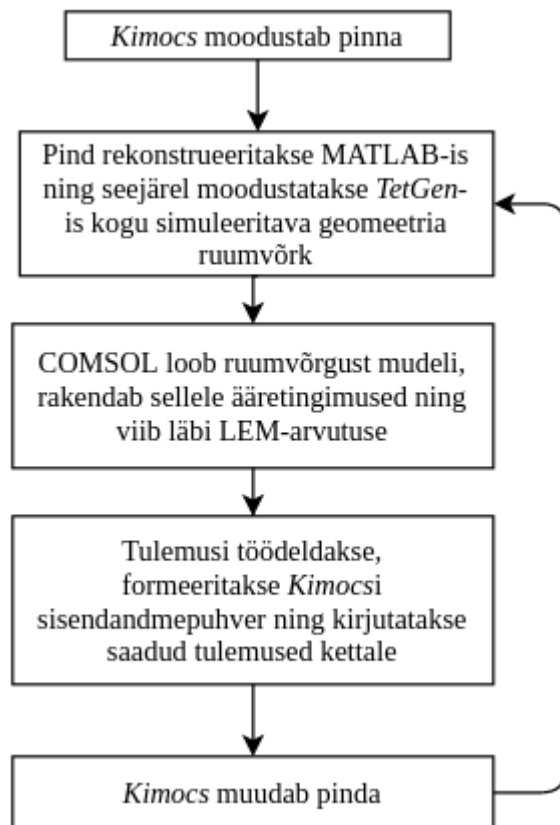
Joonis 5: Arvutatavate suuruste seoste skeem.

3 Mudel ja metoodika

3.1 Kasutatav tarkvara

Käsitletav mudel on konstrueeritud, et simuleerida vasespinna nanodefekti ning selle evolutsiooni kõrges elektriväljas, olles kooskõlas CLIC-i kiirendiprojekti komponentide katsetamisel täheldatud elektriliste läbilööride väljapakutud tekketeooriaga [4,6]. Mudeli analüüsimiseks on kirjutatud tarkvarapakettis Matlab [40] implementeeritud kood *Femocs*, mis kutsub välja ning kontrollib kõiki vajalikke väliseid tarkvarasid, töötleb pinda ning töötleb ja salvestab arvutustulemused. Järgneb lühiülevaade kõikide kasutatud välistest tarkvaradest koos nende ülesannetega, mille juurde kuulub skeem joonisel 6.

- *Kimocs* [41] loob pinna alusgeomeetria ning viib läbi selle muutusi, lähtudes kineetilisest Monte Carlo arvutusest.
- *Kimocsi* moodustatud pind rekonstrueeritakse MATLAB-is, et minna atomistlikult pinnalt üle pidevale pinnale.
- Rekonstrueeritud pinnast moodustatakse simuleeritav ruumvõrk, kasutades *TetGeni* [42].
- COMSOL rakendab ruumvõrgule ääritingimused ning lahendab LEM-arvutust kasutades võrrandid.
- MATLAB-is töödeldakse arvutustulemused sobivasse formaati, salvestatakse arvutustulemused ning moodustatakse sisendfail *Kimocsi*, mille järel algab uus iteratsioon.



Joonis 6: *Femocsi* tööskeem.

Pinna muutumine *Femocsi* tsüklis on kindla aja- või tsüklisammuga. Ajast sõltuval juhul jälgime pinnadefekti kuju muutust ning sellega kaasnevaid emissioonivoolude, mehaaniliste pingete ning elektrivälja tugevuse sõltuvusi ajast. Teisel juhul tehakse igas iteratsioonis kindel arv aatomhüppeid pinnal ning tähelepanu on pööratud sellele, kuidas sõltuvad simulatsioonitulemused mõnedest algparameetritest; näiteks uuritava pinnadefekti laius uuritava pinnatüki laiuse suhtes.

Igas *Femocsi* iteratsioonis lahendatakse ääritingimusvõrrandid elektrivälja, mehaanilise pinge ning emissioonivoolude jaoks. Lõplike elementide meetodiga arvutatavatest tulemustest interpoleeritakse lähima naabri meetodil nii elektrivälja, emissioonivoolude, lokaalse temperatuuri kui ka pinge

nominaalsed väärtused iga aatomi koordinaatide jaoks. Tulemused antakse ette *Kimocs*ile, mille viimased versioonid võimaldavad kasutada COMSOL-is arvutatud aatomi nominaalset lokaalset temperatuuri pinna muutumise mõjutamiseks. Samas on aatomite pinnatemperatuuri arvestamise metoodika veel arendamisjärgus nii numbrilise kui teoreetilise implementatsiooni osas.

Kuigi *Kimocs* kasutab aatomikoordinaatidesse interpoleeritud lahendeid, viiakse järgmisse tsükli iteratsiooni kaasa eelmise iteratsiooni lahendid muutmata kujul, andes ette arvutatavale lahendile lähedased väärtused. Kuni kasutada piisavalt väikseid ajasamme, jäävad eelmise iteratsiooni pinna suhtes toimunud muutused piisavalt väikeseks, et kaasatoodud arvutustulemustel säiliks füüsikaline mõte. *Femocsi* simulatsiooni lõpptingimuseks on soovitud arvu *Femocsi* iteratsioonide läbitegemine.

3.2 Vase atomaarpinna dünaamika tarkvaras *Kimocs*

Tarkvara *Kimocs* on Helsingi ülikoolis kirjutatud PhD Ville Janssoni poolt kineetilise Monte Carlo algoritmil põhinev atomistliku pinna nanodefekti dünaamikat kontrolliv algoritm. *Kimocs* on valideeritud võrdlusele molekulaardünaamiliste arvutusmeetoditega ning kvalitatiivselt ka eksperimentaalselt. Järgnev peatükk toetub suuresti *Kimocsi* autori artiklile [41].

Kimocsi alus on jäik tahkkeskendatud kuubiline aatomvõre (fcc), mille igas sõlm on kas hõivatud aatomi poolt või mitte. Aatomvõre võimalikud orientatsioonid on $\{100\}$, $\{110\}$ ning $\{111\}$, millest käesolev töö kasutab esimest. Igal KMC sammul saab üks aatom liikuda (ehk hüpata) hõivamata esimest järku naaberkohale. Sellised hüpped on terminiselt indutseeritud. Aatomite ülekandesagedus käitub vastavalt Arrheniuse võrrandile [43]:

$$\Gamma = \nu \cdot e^{\left(\frac{-E_m}{k_B \cdot T}\right)} \quad (44)$$

- ν - sagedusfaktor
- Γ – üleminekukiirus (*transition rate*)
- E_m – üleminekuenergia
- T – süsteemi temperatuur
- k_B – Boltzmanni konstant

Kimocsis kirjeldatakse üleminekuprotsesse nelja numbriga: {a,b,c,d}. Nende vastavad tähendused on esimest ning teist järku naabrite arv esialgses kohas (a,b) ja samad suurused kohas, kuhu hüpe toimus (c,d). Üleminekuenergia E_m *Kimocsis* mingi aatomi jaoks sõltub neist suurustest. Fcc kristallis saab esimest järku naabreid olla 0-12 ning teist järku naabreid 0-6. Eri kombinatsioonidele vastavad üleminekuenergiad on eelnevalt välja arvutatud. [41]

Ühele KMC üleminekule vastav ajasamm arvutatakse järgnevalt [41]:

$$\Delta t = \frac{-\log u}{\sum_i \Gamma_i} \quad (45)$$

- u – juhuslik arv vahemikus (0;1]
- i – kõikide võimalike sündmuste arv simulatsioonisammus
- Γ_i – sündmusele i vastav üleminekukiirus

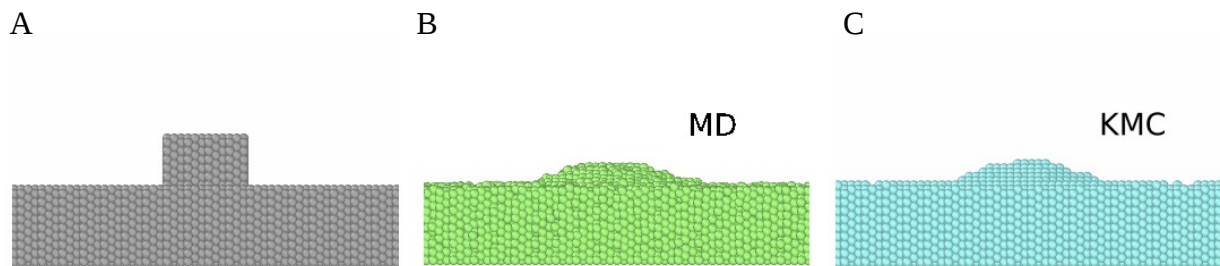
Aatommigratsiooni energiabarjäärade määramiseks otsitakse sadulpunkti alg- ja lõppkonfiguratsiooni ümbritseval energiamaastikul. Nende väärtuste arvutusmetoodika on järgnev: ülemineku alg- ja lõppkonfiguratsioonid relakseeritakse kaas-gradientmeetodiga, seejärel arvutatakse hüpet tegeva aatomi jaoks minimaalset energiat nõudev teekond, kasutades *Nudged Elastic Band* (NEB) meetodil põhinevat MD koodi PARCAS-t, mis kasutab omakorda aatomitevahelise potentsiaali arvutamiseks *Corrected Effective Medium* (CEM) teooriat. Energiabarjäärade arvutamisel tekkivaks standardhälbeks saadi 0.13 eV ehk 14.8%. [41,44]

Ebastabiilseteks positsioonideks nimetatakse *Kimocsis* kohti võres, kus aatomil on 3 või vähem esimest järku naabrit. Sel juhul on migratsiooni energiabarjääri väärtused nullilähedased ning hüpped on kohesed. Nullbarjääridega kaasnevate probleemide vältimiseks esitatakse barjäärile väike energieetiline väärtus, mis allub seaduspärale:

$$E_m(a, b, c, d) = \epsilon a + \delta b + \epsilon c^{-1} + \delta d^{-1} \quad (46)$$

Kasutatud väärtused siin on $\epsilon = 10^{-3} \text{ eV}$ ning $\delta = 10^{-4} \text{ eV}$, arvestamaks, et esimest järku naabrite mõju barjääridele on suurem kui teist järku naabrite mõju. Suurused a, b, c, d on eelpool defineeritud. Seeläbi eelistatakse ebastabiilsetelt positsioonidelt lähtuvatest hüpetest neid, kus on esimest järku naabreid vähem, hoolimata asjaolust, et erinevused migratsioonibarjäärade suuruste vahel on väga väikesed. Väärrib märkimist, et nii seatud energiabarjäärid on väärtuste poolest isegi soojuslike energiate kõrval tühised. *Kimocs* eeldab, et eelistatud on hüpped kohtadesse, kus esimest ja teist järku naabreid on rohkem [41]. Aatomid, mis hüppavad pinna pealt ära, loetakse aurustunuks ning asendatakse vakantsiga.

Nanodefekti muutumisele relevantse ajalise skaala andmiseks on sagedusfaktor ν määratud võrdluse abil samasuguse nanodefekti kokkuvajumisprotsessides MD-s ning *Kimocsis*. Kuna kõik üleminekud on aatomi hüpe mingisse oma vabasse esimest järku naaberpositsiooni, saab kõigi üleminekute jaoks eeldada sarnast sagedusfaktori väärtust. *Kimocsis* valiti sagedusfaktoriks MD tulemustega sobitamisel vasepinna Debye sagedusele ($4.5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$) kõige lähedasem saadud väärtus ($7 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$). [41,43]



Joonis 7 A-C: A: Risttahukalise emitteri algstruktuur. B: Kuubilise defekti kokkuvajumise vaheetapp MD-s. C: Kuubilise emitteri kokkuvajumise sama vaheetapp Kimocsis [41]

Kimocsisist saadavad tulemused on sarnased MD tulemustele süsteemitemperatuuridel üle 800K, seejuures kaks suurusjärku väiksema arvutusajaga. Madalamatel temperatuuridel on MD meetodika väga aeglane, seega puudub info madalatemperatuursete tulemuste võrdlemiseks. Kimocsis aga on selge, et defektide stabiilsus kasvab järsult süsteemi temperatuuri alanedes. [41]

Kimocsi autor rõhutab, et süsteem ei arvesta ruumilisest skaalast tingitud materjali omaduste muutumist. On näidatud, et 20 nm-st väiksema läbimõõduga vasktraadi sulamistemperatuur kahaneb järsult diameetri vähenedes [45]. Kuigi kasutatavad CEM potentsiaalid arvestavad selliseid nähtuseid, siis Kimocsi süsteemis muutusid seetõttu pinna relakseerumisprotsessid ebastabiilseks, mistõttu seda omadust Kimocsi ei arvesta. [41]

Esialgne geomeetria iga simulatsiooni alguses on lihtne muudetavate mõõtmetega atomistlik risttahukas või kuup, nagu näha näiteks joonisel 7A, mis asetub tasase atomistliku pinna peale uuritava simulatsioonikasti keskele. Simulatsioonikast on muudetava suurusega, võimaldades käsitleda pindu kuni 200x200 aatomit, arvestamata siinjuhu z -mõõdet, mis on samuti piiratud 200 aatomini. Uuritavaks pinnaks on fcc konfiguratsioonis vase monokristall võrekonstandiga 0.3597 nm [46]. Maksimaalne uuritava pinnatüki pindala on $6.2 \cdot 10^{-15} m^2$ maksimaalne uuritava defekti kõrgusega ca 72 nm.

Simulatsioonikasti suurus võib LEM-arvutuse tulemusi mõjutada, kuna kasti külgtahkudele on LEM-i mudelis määratud isoleerivad ääritingimused. Kuna ruumipiirkond, kus arvutusi läbi viiakse, on fikseeritud kõrgusega, tähendab Kimocsi simulatsioonikasti suuruse muutmine vaid uuritava pinnatüki pindala suurendamist. Seega ruumipiirkond, milles arvutused läbi viiakse, suureneb vaid külgsuundades.

3.3 Lõplike elementide meetod

Pinna rekonstrueerimisel saadav võrk on aluseks lõplike elementide meetodi kasutamisele rajaülesannete numbrilisel lahendamisel. Võrk koosneb sõlmpunktidest ning elementidest [22]. Sõlmpunktid on diskreetsed punktid vaadeldavas piirkonnas [47]. Elementid jagunevad 3-mõõtmelisel juhul kaheks: pinna- ja ruumielemendid. Esimene neist on 2-mõõtmeline, teine 3-mõõtmeline lihtsa geomeetriaga objekt, mille igas tipus on sõlmpunkt [22,47]. Kogu määramispiirkond jaotatakse diskreetseks arvuks elementideks. Seejuures on naaberelementide ühistes tippudes sõlmpunktid [47]. Lihtsustatult kokku võttes saame kogu määramispiirkonna

keerulise geomeetria muuta diskreetsete lihtsa geomeetriaga objektide summaks.

Elementide suurused ning paigutus määrab suuresti saadava lahendi täpsuse ning arvutuseks kuluva aja [47]. Väikeste elementide puhul on lahend täpsem, ent arvutamiseks kulub kauem aega, kuna elemente on määramispiirkonnas rohkem. Üldine juhtnõr elementide paigutuse ning suuruse osas on, et piirkondades, kus lahendi gradient on suur, peaks kasutama väikseid elemente; vastasel juhul võib kasutada suuremaid elemente [47]. Kõverate pindade puhul kasutatakse kahemõõtmelisi ühetasandilisi pinnaelemente, millest tulenevalt on pinna konarustes ning nende ümbruses palju pinnaelemente, järgides esialgset pinnakõverust võimalikult hästi [47].

Võre sõlmed ning elemendid nummerdatakse automaatselt algoritmiseselt. Lõplike elementide meetod põhineb lineaarsete võrrandite süsteemi - mis on sisu poolest otsitava lahendit täpselt kujutava funktsiooni lähendamine tükiti pidevate polünoomfunktsioonidega - lahendamisel [47]. Võrrandisüsteemis on osad koefitsiendid nullid, mistõttu saab optimaalse süsteemi nummerdamise puhul tekitada süsteemimaatriksist ribamaatriksi, millest jäävad nullkoefitsiendid välja. See võimaldab saavutada mitmekordset erinevust saadavate lineaarvõrrandite arvu ning seeläbi arvutuste efektiivsuse vahel [47].

Elementides kasutatakse polünoomiaalset lähendust üldlahendile, millega interpoleeritakse lahendi sõlmpunktide vahele üldlahendi väärtusi sõlmpunktides ning mille järgust sõltub saadava võrrandisüsteemi kompleksus [22,47]. Igale sõlmpunktile määratakse kujufunktsioon nii, et tema väärtus on 1 sõlmpunktis, kus ta on määratud, muudes sõlmedes aga 0 [47]. Käsitletavas mudelis on olenevalt arvutatavast suurusel kasutuses lineaarsed ehk esimest järku kujufunktsioonid ning teist järku ehk lisaks lineaarliikmetele ka ruutliikmeid sisaldavad kujufunktsioonid [22,47].

Võrgu kõikide elementide interpolatsioonipolünoomid välja kirjutades saab võrrandite süsteemi, mis kirjeldab kogu määramispiirkonda. Ühe elemendi interpolatsioonipolünoom avaldub üldkujul [47]:

$$\varphi^e = N_i^e \Phi_i + N_j^e \Phi_j + N_k^e \Phi_k + \dots + N_r^e \Phi_r \quad (47)$$

Siin on N_i kujufunktsioon sõlme i kohta elemendis e ning Φ_i on üldlahendi väärtus sõlmes i , kui elemendis on r sõlme. φ^e on lahendi lähendväärtus mingis punktis elemendi sees. Kuna kujufunktsiooni väärtus on 1 vaid sõlmes, millele ta on määratud ning 0 mujal, siis sellest järeldub, et võresõlmedes on saadav väärtus ühene üldlahendi väärtusega selles punktis.

Interpolatsioonipolünoome kasutatakse testfunktsioonina, kirjutamaks üldine arvutatav võrrand lahti tema nõrgas formulatsioonis [22] iga elemendi kohta võrgus. Toome näiteks algvõrrandi:

$$\nabla \cdot \Gamma = f \quad (48)$$

Selle nõrk formulatsioon oleks:

$$\int_{\Omega} v \nabla \cdot \Gamma dV = \int_{\Omega} v f dV \quad (49)$$

kus v on testfunktsioon ehk kujufunktsioonidest sõltuv interpolatsioonipolünoom [22]. Järelikult toome nõrga formulatsiooniga sisse ka lahendi määramispiirkonna ruumilise diskretiseerimise [22].

Kui ruumilist resolutsiooni suurendada ehk kujufunktsioonide hulka suurendada, läheneb saadav üldlahend täpsele lahendile [22].

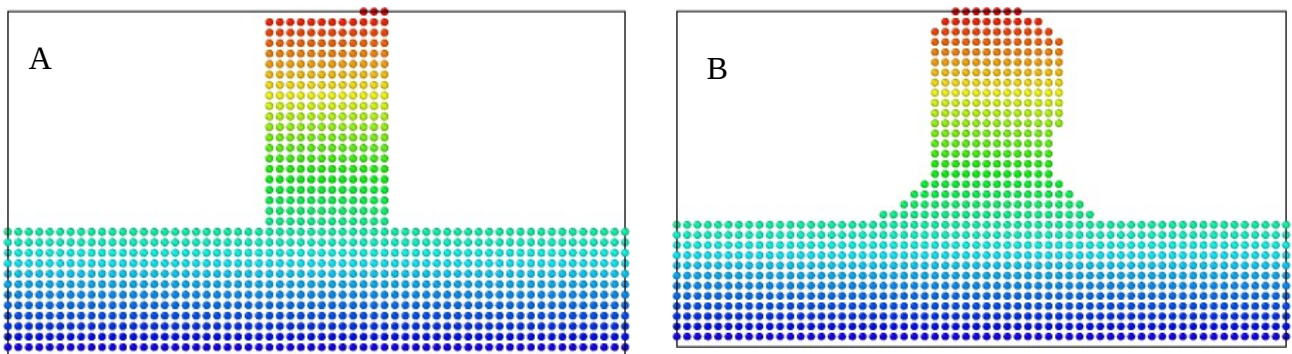
Testfunktsiooni ning nõrga formulatsiooni kombinatsioonina saab lahendamisel esmalt funktsionaali minimeerimise kaudu lineaarvõrrandite süsteemi [47], mis on tingitud lahendi määramispiirkonna ruumilisest diskretisatsioonist [22]. Piisava hulga ääritingimuste olemasolul on see süsteem lahendatav, andes tulemusena lahendimaatriksi, mis annab lahendi täpsed väärtused võre sõlmpunktides [22,47]. Seejärel on võimalik lähenduspolünoomide kaudu leida lahendi lähendväärtused elementide sees [47].

Kasutatavate ääritingimuste tüüpideks on Neumanni ning Dirichlet' tüüpi ning kombineeritud ääritingimused [22]. Neumanni tüüpi ääritingimused kirjeldavad vooge, jõude või üldiselt vektoriaalse iseloomuga ääritingimusi [22]. Dirichlet liiki ääritingimused on skalaarse iseloomuga, seades määratud piirkonnas lahendile etteantud väärtused [22].

4 Simulatsioonitulemused ning arutelu

4.1 Pinna rekonstrueerimine

Kimocs annab iga iteratsiooni lõpus välja andmepuhvri, kus on salvestatud kõik aatomikoordinaadid ning lisaks mõningad andmed iga aatomi kohta. Lõplike elementide meetodi kasutamiseks arvutamisel on vaja diskreetsetest punktidest koosnev pind, nagu näidatud joonistel 8A ning 8B, muuta punktipilvest pidevaks pinnaks. Samamoodi peab pinnaaluse uuritava ruumiosa kohta ning pinna kohale jääva vaakumile määratud ruumiosa muutma ühilduvateks ruumvõrkudeks. Pinna rekonstrueerimise eesmärk on genereerida esialgsest punktipilvest ruumi- ja pinnaelementide süsteem, mis säilitab andmed pinna asukohast selles süsteemis. Selle kohta kasutatakse terminit võrk (inglise keeles *mesh*). Käesoleva töö raames on katsetatud 2 erinevat tehnikat selle saavutamiseks: esmalt *splain*imeetodit, kus pind ehitatakse osaliselt üles COMSOL-is, ning teisena meetod, kus pind koos arvutusvõrguga ehitatakse täielikult COMSOL-iväliselt üles. Detailselt on mõlemad kirjeldatud allpool.



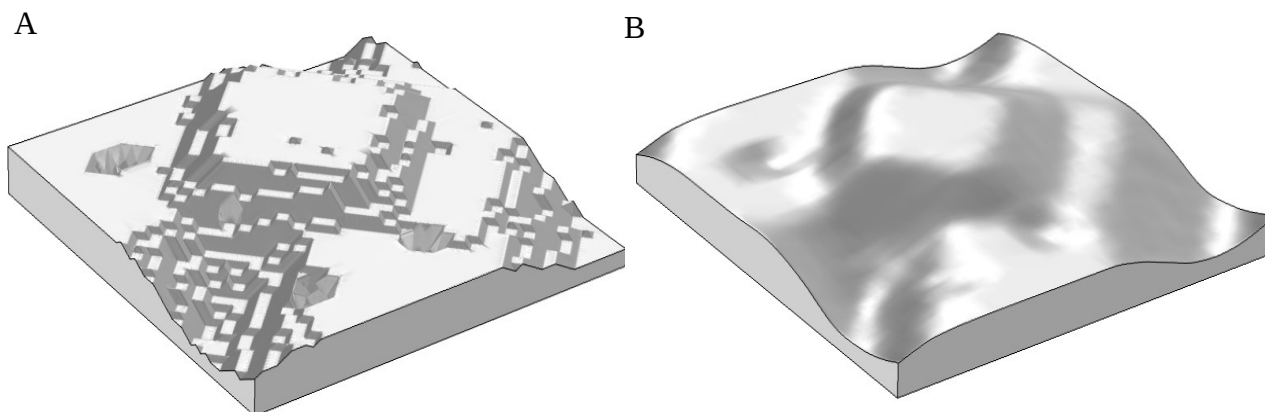
Joonis 8 A-B: Simulatsiooni alggeomeetria - 60x60x60 aatomilises simulatsioonikastis pinnale asetatud defekt mõõtmega 10x10x30 aatomit. Seejuures on pinna alla jäetud 10 kihti kristallisiseseid aatomeid. Värvikood sõltub individuaalse aatomi z-koordinaadist. B: Sama geomeetria pärast 6 ns relakseerumist *Kimocsi* 1000K juures. Tehtud hüpete arv ca 770000. Visualisatsioon genereeritud ovitoga [48].

4.1.1 Parameetrilise pinna meetod COMSOL-is.

Esimene meetod pinna rekonstrueerimiseks oli COMSOL-i siseste tööriistadega parameetrilise pinna loomine *Kimocsi* loodud aatomkoordinaatide tabelist. Parameetriline pind on COMSOL-i mõistes primitiivse geomeetria vorm [22], kus luuakse korrapärane x-y alusvõrk, mille igale x-y tasandis asuvale punktile seatakse vastavusse z-koordinaadi väärtus [22], teisisõnu pinna kõrgus nulltasandist sellel kohal. Meetodi eeliseks on kiirus ning kasutuslihtsus, kuna lubab arvutatava geomeetria luua COMSOL-i siseselt, tagades arvutuste stabiilsuse.

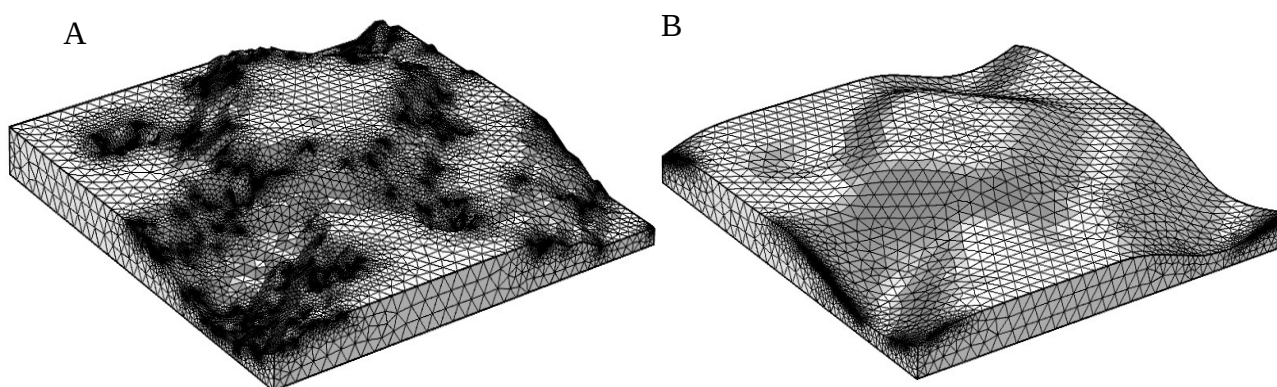
Kimocsi välja antav aatomvõre on selle meetodi otseseks kasutamiseks liiga hõre. Seda kasutades jäävad pinnale ebafüüsikalised teravad nurgad ning servad, mida on hästi näha joonisel 9. Seetõttu on vaja pinda siluda. Et pind järgiks silumisel esialgseid aatomikoordinaate võimalikult hästi, interpoleerisime aatomipunktide vahele punkte juurde – nende täpne arv jäeti üheks kirjutatud silumiskordsuse algparameetritest. Seejuures tuli arvestada, et liigne interpoleerimisepunktide

lisamine muutus üsna kiiresti arvutuslikult ebamõistlikult mahukaks. Silumisel oli oluline pinda siluda piisavalt palju, et kaotada mainitud teravad nurgad ning servad, kuid samas järgida piisavalt hästi esialgseid aatomikoordinaate. Selle saavutamiseks jäi teiseks algparameetriks silumisaakna küljepikkus. Silumiseks kasutasime andmepunktide koordinaatide liikuvat keskmist.



Joonis 9 A-B: Joonisel A on Comsolis ehitatud pind esialgsetest töötlemata punktikogumist. Joonisel B on sama pind eelneva aatomvõre punktide vaheliste punktide juurde interpoleerimise ja silumisega, kasutades silumisaakna küljepikkusena nominaalset vase võrekonstanti.

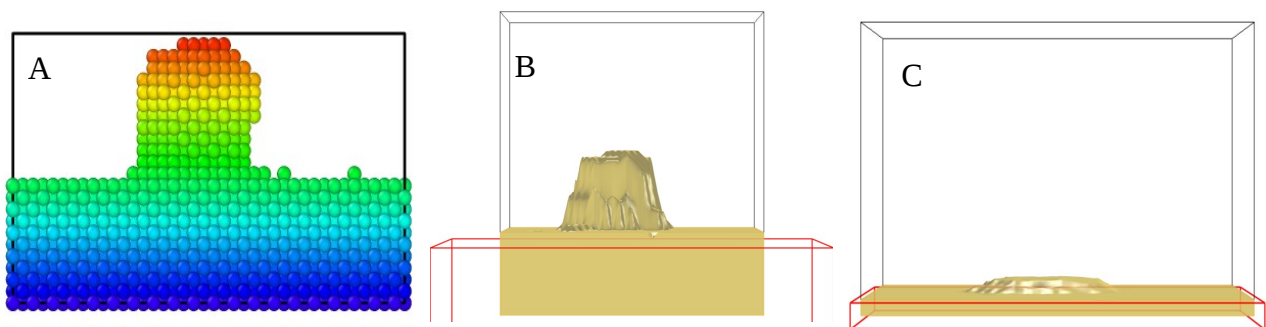
COMSOL-i välise pinnaandmete töötlemise tulemusena saab lihtsamini käsitletava pinnamudeli, millel puuduvad teravad nurgad ning servad. See on samas olemuselt siiski diskreetsete punktide kogum, ehkki oluliselt tihedam kui esialgne variant. COMSOL loob sellest arvutustes kasutatava splinepinna, leides vajadusel lineaarse interpoleerimisega lisapunkte [22].



Joonis 10 A-B: LEM-metoodika kasutamiseks vajaminevad võrgud, genereeritud vasakul silumata pinnale ning paremal silunud pinnale. Mõlemal toodud juhul on eemaldatud pinna kohal olev vaakumi ruumvõrk.

Näitena hõlmab joonisel 10A kujutatud võrk märgatavalt suuremat hulka elemente, võrreldes joonisega 10B, millest tulenevalt on võrku 10A kasutades arvutusaeg oluliselt suurem. Samuti näeme võrgus 10A teravate nurkade piirkondi, mille ümbruses on lahendid ebausaldusväärsed. Sama pinna silumisega saavutame pinna 10B, millel puuduvad ebafüüsikalised teravad nurgad ning arvutusvõrk ise on üldiselt meid huvitavas osas märksa hõredam. Küll on võrguehitusanomaaliad olemas osades kohtades parempoolse võrgu ääres.

Kuigi pinna-aatomite koordinaatide vahele punktide juurde interpoleerimise ning selle järgse pinna silumise algoritmiga saab lahti aatomstruktuuri hõredusest tingitud anomaaliatest loodud pindades ning neist genereeritud arvutusvõrkudes, pole selline lahendus ammendav. See töötab hästi juhul, kui pind on moodustunud nii, et igale x - y koordinaadipunktile vastab vaid 1 z -koordinaadipunkt. Sellist eeldust rangelt teha ei saa. Senikirjutatud algoritmile näiteks seenekujulise defektiga pinda ette andes moonutus geomeetria tugevalt. Punktide juurde interpoleerimine, pinna silumine ning ka COMSOL-i parameetrilise pinna loomine on kõik funktsioonid, mis toetuvad eeldusele, et igale x - y punktile vastab 1 z koordinaat. Mitme z -koordinaadi olemasolul samas x - y punktis keskmistatakse kõik need z -väärtused, andes välja pinna, kus on vaid 1 z -väärtus igal x - y võrepunktil. Selle käigus skaleerub pinnadefekti kõrgus mõnevõrra alla, z -telg üles ning esialgselt pinnatopograafiast säilivad vaid vihjed.



Joonis 11 A-C: Joonisel A on atomistlik pind. Joonisel B on samast pinnast COMSOL-isisese parameetrilise pinna rekonstruktsioonimeetodiga saadud pind ilma silumise ning interpoleerimiseta. Joonisel C on sama pind sama rekonstruktsioonimeetodiga koos interpoleerimise ning silumisega nominaalse võrekonstandi suuruse küljepikkusega silumisaknaga.

Märkus: Kõik pildid on tehtud sama nurga alt.

Tutvustatud pinnarekonstruktsioonimeetodi eeliseks oli arvutusteks optimaalse ülesehitusega võrk. Sellest tulenevalt oli arvutusaja ning arvutustulemuste kvaliteedi vaheline kompromiss kontrollitud COMSOL-i poolt. Esialgsed KMC simulatsioonid ei ennustanud nõgusate pindade tekkimist, mistõttu sellise pinnarekonstrueerimismeetodi eelised kaalusid üle võimalikud puudused. Kimocsi hilisemad täpsemad parametrizeerimised lükkasid selle eelduse ümber, mistõttu osutus tarvilikuks robustsema pinnarekonstrueerimismeetodi leidmine.

4.1.2 Nõgusate pindade rekonstrueerimine

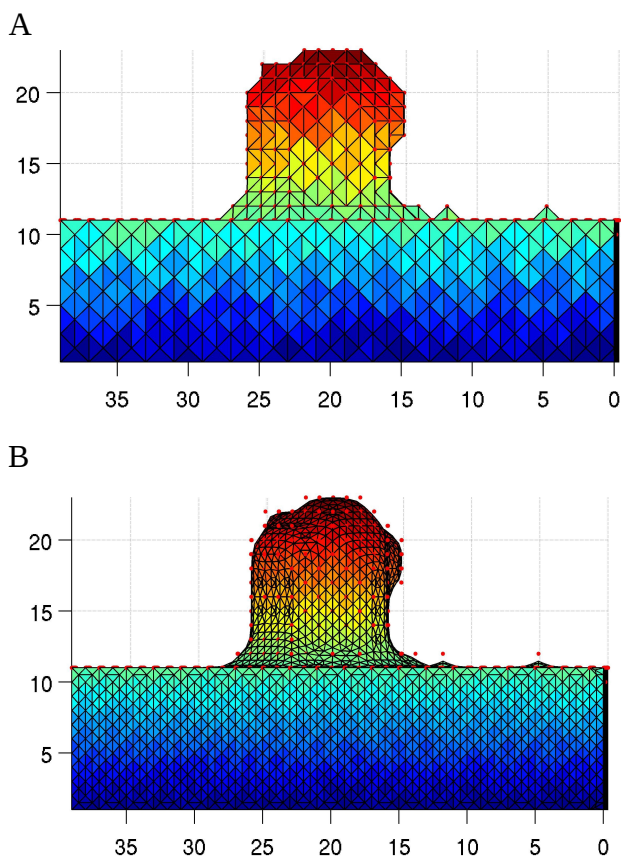
Mudeli geomeetria ruumvõrgu loomiseks COMSOL-iväliselt saab kasutada tarkvarasid *TetGen* [42] ning *iso2mesh* [49]. Pinna väliseks rekonstrueerimiseks oli lähtepunktiks lihtsaim võimalik mudel, kus võrgu sõlmpunktid asuvad aatomikoordinaatides. Selle meetodi puhul on eesmärgiks võimaldada arvutusalgoritmi terviklik kasutamine ning sel juhul saadud pinnaga esialgsete arvutuste tegemine. Kuna võrgu sõlmpunktid on asetatud aatomkoordinaatidesse, siis me saame neist arvutustulemused, mis ei saagi olla täielikult täpsed. Samas on see prototüüpse rekonstrueerimisalgoritmina hea alguspunkt tulevastele komplekssematele algoritmidele.

Meetodis luuakse *Kimocsi* väljundi põhjal ruumivõrk, mille sõlmpunktid asuvad esialgse aatomstruktuuri aatomkoordinaatides. Sellele lisatakse vaakumiossa tekitatud ruumivõrk, tekitades sinna punkte ning elemente juurde. Saadud võrgus defineeritakse eraldi materjali-vaakumi piirpind koos selle pinnaelementidest koosneva pinnavõrguga ning säilitatakse info võrgu ruumelementide kuuluvusest võrgu materjali- või vaakumiossa. Ruumvõrgu laius sõltub *Kimocsi* väljundist, ruumvõrgu kõrgus aga on fikseeritud suurus, seejuures märkimisväärselt kõrgem kui *Kimocsi* simulatsioonikasti suurus.

Joonisel 12 on toodud ruumvõrgu loomise skeem. Esmalt luuakse esialgsetest aatomkoordinaatidest Delaunay triangulatsiooni [22] abil kolmnurksed elemendid. Seejärel eemaldatakse liiga pikkade külgedega elemendid võrgu kvaliteedi huvides. Piklikes elementides võib lahendi interpoleerimine anda ebatäpsemaid tulemusi. Seejärel tehakse materjali domeeni kõigist külgedest pinnavõrgud. Seejärel defineeritakse neli punkti, mis määravad, kui kõrgele ning kui kaugemale materjali pinnast ulatub vaakumi ruumivõrk. Vaakumi ruumivõrgule määratud ruumi jaoks tehakse samuti kõikidest külgedest pinnavõrgud. Seejärel liidetakse vaakumi ning materjali domeenide pinnavõrgud vastavalt *TetGen*-i sisendparameetrite nõuetele [50]. Viimase sammuna moodustatakse saadud pinnavõrkude kogumist ruumivõrk, kasutades tarkvarapaketti *TetGen*.

Jooniselt 13A on selgelt näha, et vase-vaakumi piirpinna võrgu ehitamisel läbi aatomikoordinaatide tekivad pinna-aatomite juurde teravad nurgad, mis põhjustavad selle punkti ümbruses lahendi ülehindamist. Nimelt, teravad nurgad põhjustavad probleeme elektrivälja täpse hindamisega. Iga võrgu edasise parendamise iteratsioon viib elektrivälja kasvuni – võrgu koonduvust selles punktis pole võimalik saavutada. Probleemid elektrivälja arvutamisel võimenduvad oluliselt emissioonivoolude tiheduste leidmisel Fowler-Nordheimi võrrandi eksponentsiaalsuse tõttu.

Selliste probleemide lahendamiseks on vajalik kas täpsema pinnarekonstrueerimise algoritmi kasutamine või tekkivate nurkade täiendav silumine pinna ettevalmistuse käigus. Kuna täpsema algoritmi loomine väljuks oma keerukuse tõttu käesoleva bakalaureusetöö ülesandepüstistusest (ühtne, töötav rakendus elektrivälja ja pinna vastastikmõju simuleerimiseks), rakendame elektrivälja arvutuste stabiliseerimiseks materjali pindade täiendavat geomeetrilist silumist. Silumise edukaks läbiviimiseks on tarvis pinnavõrku täiendavalt tihendada, iga kolmnurkse pinnaelemendi väiksemateks kolmnurkseteks tükkideks jagamise teel. Vastasel juhul ei eemalda silumisalgoritm teravaid nurki, vaid ainult kahandab pinnakonaruste kõrgust täiendavalt.

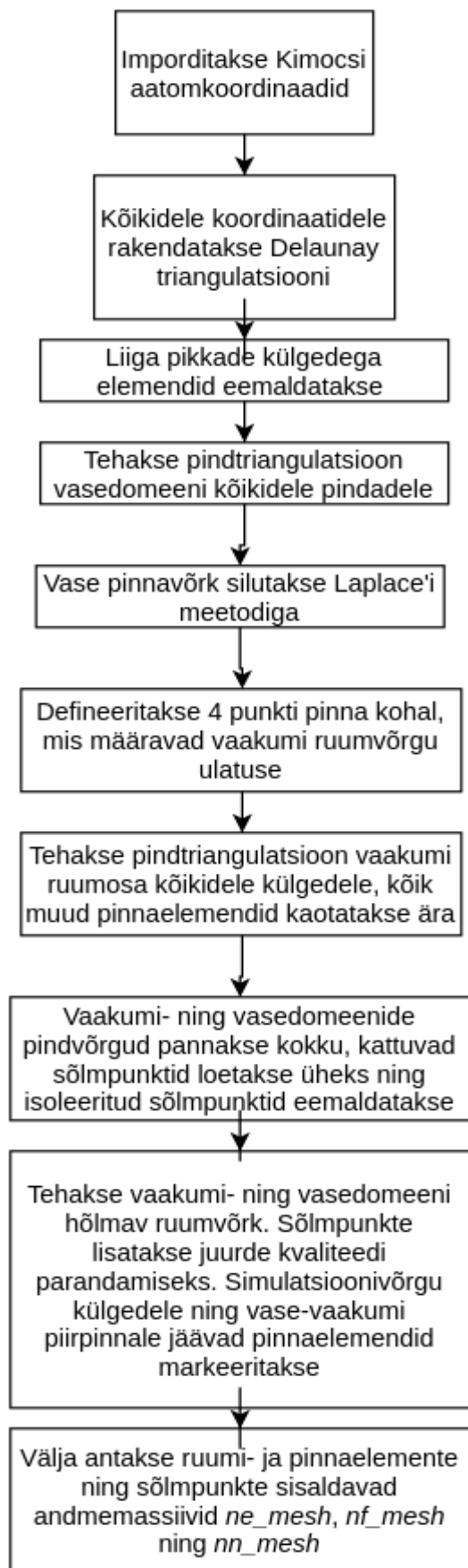


Joonis 13:

A: Pinna rekonstrueerimisel saadud silumata pind ilma lisatud sõlmpunktideta. Punased täpid on pinna-aatomite koordinaadid. Telgedel kujutatud Kimocsi koordinaate. Värviskaala näitab z-koordinaati.

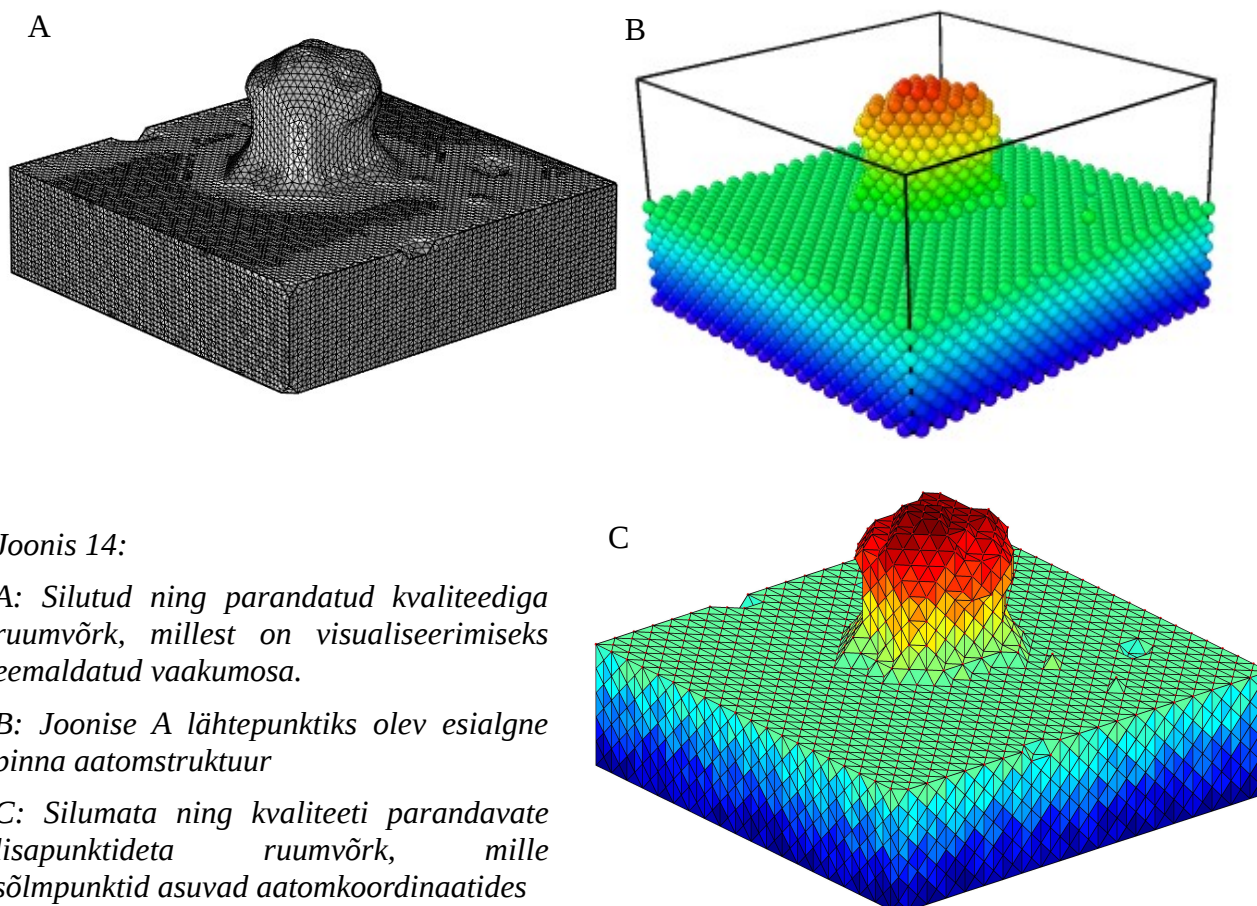
B: Joonisel A olev pind silumise ning sõlmpunktide juurdelisamisega.

Jooniselt 13B on näha, et võrreldes esialgsete aatomkoordinaatidega on kohati silutud pinna deformeerumine märgatav, kuid jääb siiski väiksemaks kui üks võrekonstant. Seega jääb hinnanguline viga võrreldes olemasoleva tarkvarapaketi HELMOD [21] samasse suurusjärku (HELMOD leiab elektrivälja ühe võrekonstandi võrra kaugemal pinnast), andes vähemalt sama täpseid tulemusi, kuid kasutades vähem arvutusressurssi.



Joonis 12: LEM-arvutuseks vajaliku võrgu loomise skeem

Geomeetrilise silumise puuduseks on piiratud kontroll selle rakendumise üle – silumine pole füüsikaliselt, vaid numbriliselt motiveeritud. Silumise rakendamine võib mõjutada aatomite ja elektrivälja vastastikmõju näiteks lokaalsete elektrivälja fluktuatsioonide mahasurumisega. See omakorda võib piirata oluliste füüsikaliste protsesside märkamist simulatsioonides. Saavutamaks paremini kontrollitavaid elektrivälja arvutusi, on tarvis luua pinna rekonstrueerimise algoritm, mis on võimeline töötama, kasutamata seejuures pinna geomeetrilist silumist. See on nõue järgnevatele pinna rekonstrueerimist täiendavatele töödele.



Joonis 14:

A: Silutud ning parandatud kvaliteediga ruumvõrk, millest on visualiseerimiseks eemaldatud vaakumosa.

B: Joonise A lähtepunktiks olev esialgne pinna aatomstruktuur

C: Silumata ning kvaliteeti parandavate lisapunktideta ruumvõrk, mille sõlmpunktid asuvad aatomkoordinaatides

Võrgu COMSOL-i mudelisse saamiseks imporditakse esmalt COMSOL-i arvutusvõrgu *mesh1* tetraeedrilised ning kolmnurksed võrguelemendid eelnevalt moodustatud andmemassiividenä *ne_mesh* ning *nf_mesh*, ja võrgu sõlmed, andmemassiiviga *nn_mesh*:

```
mesh1.data.setElem('tet',ne_mesh(:,1:4))-1);
```

```
mesh1.data.setElem('tri',nf_mesh(:,1:3))-1);
```

```
mesh1.data.setVertex(nn_mesh);
```

Seejärel täpsustatakse iga võrgu ruumi- ning pinnaelemendi kohta indeks, mis määrab elemendi kuuluvuse vaakumi- või vasedomeeni:

```
model.mesh('mesh1').data().setElemEntity('tet', int32(ne_mesh(:,5)));
```

```
model.mesh('mesh1').data().setElemEntity('tri', int32(nf_mesh(:,4))+1);
```


Seejärel pannakse võrguelemendid võrguks kokku:

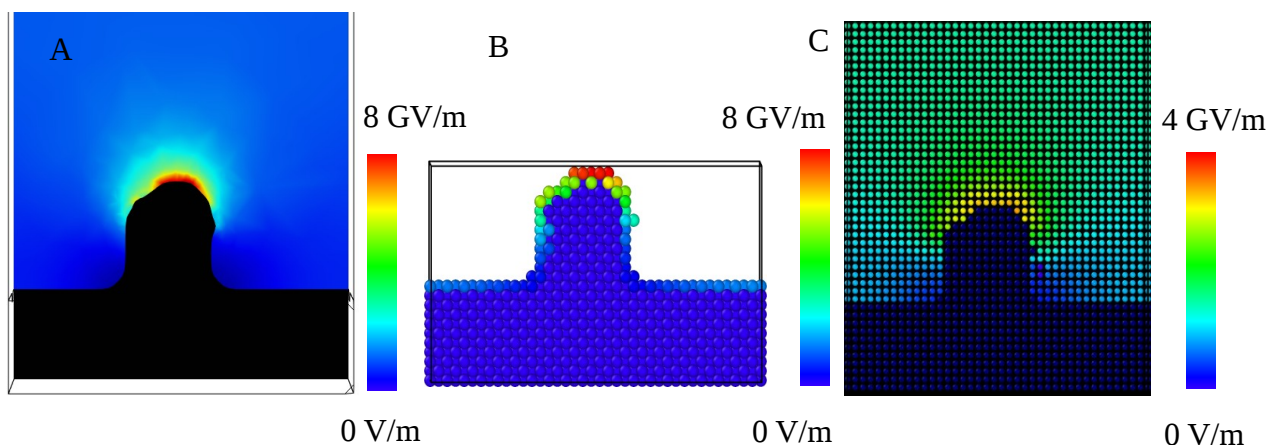
```
mesh1.data.createMesh;
```

```
mesh1.run;
```

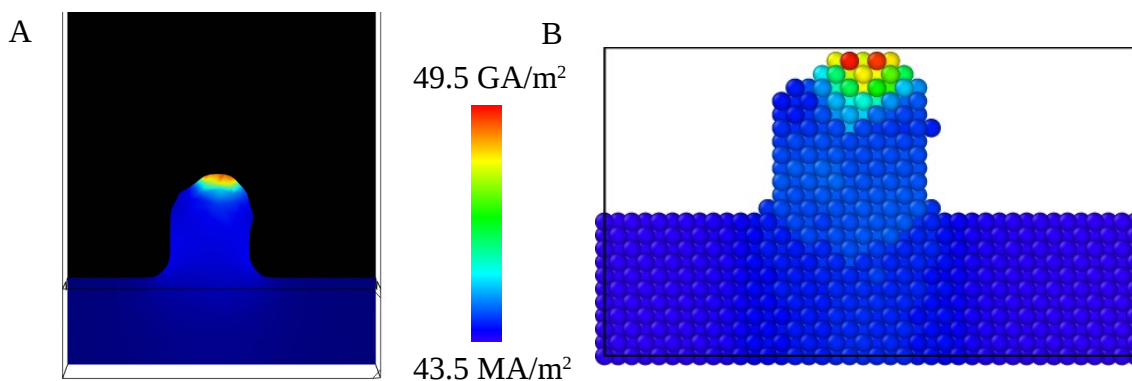
Mudelile ääritingimuste rakendamiseks peab eraldi defineerima kõik geomeetria küljed ning materjali-vaakumi piirpinna. Selleks tuleb kasutada COMSOL-i sisest meetodit *Geometry Sequences: Box Selection* [22], millega saab ette anda kastide parameetrid, mille sisse jäävatest elementidest leiab COMSOL vajalikud pinnad või domeenid. Seeläbi saab täielikult luua soovitud mudeli geomeetria välise võrgu kaudu.

4.2 LEM-i lahend atomistlikus esituses

Kuna arvutuste lähtepunktiks on atomaarne pind, interpoleeritakse LEM-arvutuste lahend aatomkoordinaatidesse. Joonisel 15 on kujutatud elektrivälja jaotust pidevas geomeetrias ning



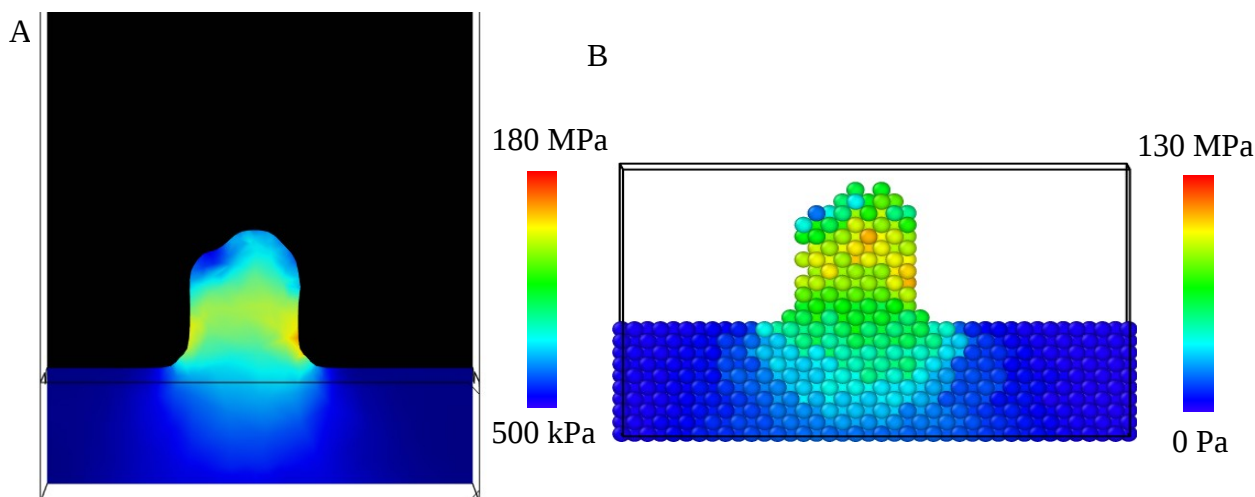
Joonis 15 A-C: Joonisel A on elektrivälja arvutustulemused LEM-is, joonisel B sama lahend interpoleerituna aatomkoordinaatidele. Joonisel C on HELMOD-iga arvutatud elektrivälja jaotus sama pinna kohal. Punane ala märgib kõrge elektrivälja tugevusega piirkonda. Rakendatud elektrivälja 1750 MV/m.



Joonis 16: Emissioonivoolude tihedused joonisel A LEM-is, joonisel B aatomkoordinaatidesse interpoleerituna. Rakendatud elektrivälja 1750 MV/m.

atomistlikus geomeetrias, joonistel 16 ning 17 sama vastavalt emissioonivoolude ja mehaaniliste pingete jaoks. Elektrivälja puhul on võrdluseks toodud lisaks HELMOD-iga pinna kohal arvutatud elektriväli, mille jaotus on selgelt sama. Kuna visualiseeritud on ühel juhul COMSOL-iga ning teistel juhtudel ovitoga, on värviskaalad erinevad. Ovitoga tehtud atomaarpinna visualisatsioonides on kahe aatomkihi paksune väljalõige eestvaates. Kahekordne erinevus HELMOD-i ning käesolevate tulemuste vahel on tingitud sellest, et HELMOD-i arvutusvõrk on hõredam ja HELMOD arvutab elektrivälja ühe võrekonstandi kaugusel pinna-aatomite ümber. Samuti, nagu eespool mainitud, kasutab HELMOD lõplike vahede meetodit koos atomistlikus resolutsioonis pinna diskretiseerimisega, mis põhjustab täiendava elektrivälja alahindamise suure kumerusega piirkondade lähedal [9].

Kõikides järgnevates 2-mõõtmelistes graafikutes on kasutatud iga iteratsiooni maksimaalseid elektrivälja tugevuse, emissioonivoolude tiheduse või mehaanilise pinge tulemusi, interpoleerituna aatomkoordinaatidesse, kuna meid huvitavad ekstreemsetele tingimustele vastavad piirkonnad. On ka mõistlik eeldada, et kõrgeimad emissioonivoolu väärtused on piirkondades, kus elektrivälja tugevus on väga suur, võimaldades nende käitumise võrdlemist.

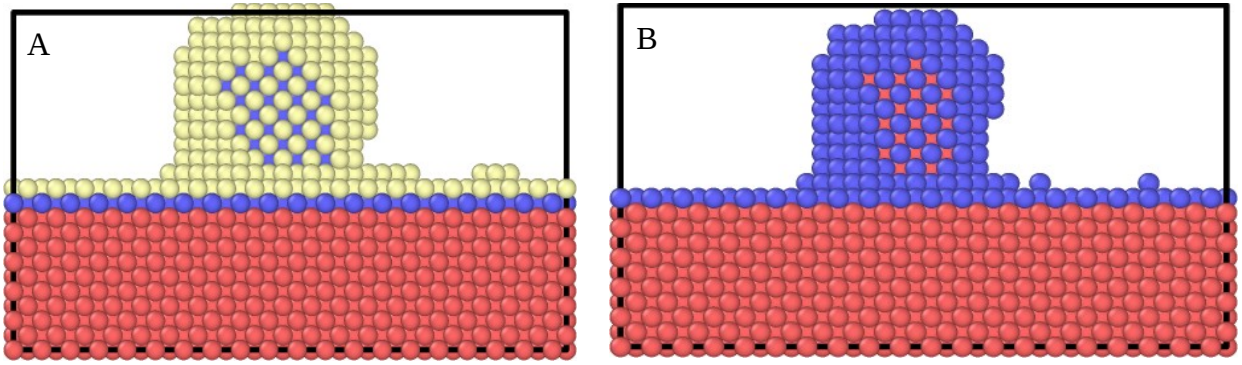


Joonis 17 A-B: Joonisel A mehaaniline pinge LEM-lahendis, joonisel B aatomkoordinaatidesse interpoleerituna. Rakendatud elektriväli 1750 MV/m.

4.3 Meetodi täpsushinnang

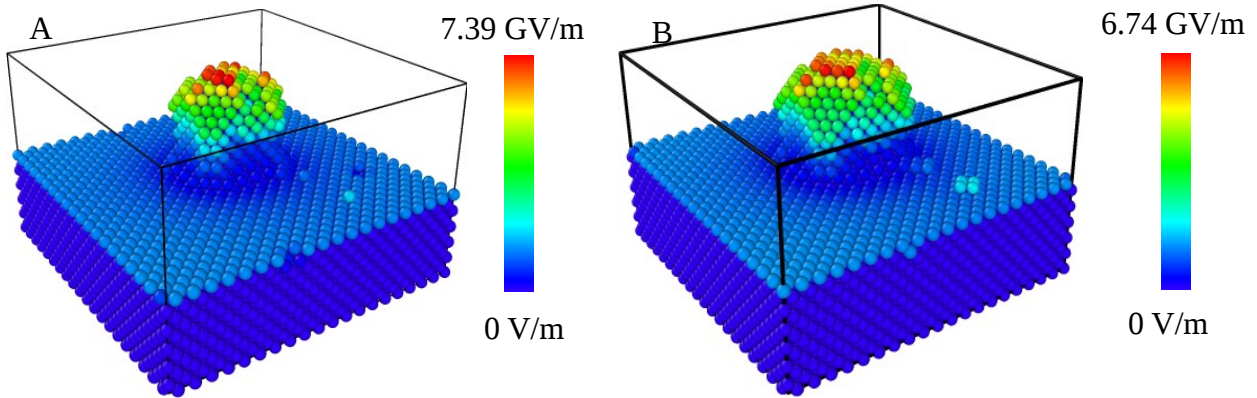
Meetodi täpsushinnang on toodud võrdlusena elektriväljade vahel, mis on arvutatud emitterile ühel juhul, kui LEM-i pind on ehitatud läbi aatomkoordinaatide, ning teisel juhul läbi pinnakihi aatomite kohal asuvate vakantside kihi koordinaatide. Vakantside kiht on *Kimocsi* virtuaalne aatomvõre kiht, mis asub pinna kohal, kaugusega 1 võrekonstant, materjali kristallvõre struktuurile vastavates asukohtades.

Pinna silumisest tuleneva vea saame siin defineeritud vea piire arvestades lugeda tühiseks, kuna pinna silumisel ei saa olla suuremat mõju kui nimetatud kahe pinna erinevusel. Teiseks on ebaotstarbekas praegust silumise mõju põhjalikumalt analüüsida, kuna tegemist on prototüüpse lahendusega ning vajalikud edasiarendused viiakse sisse töö järgmiste etappide käigus.



Joonis 18: Näidisemitter, millel pinna-aatomid on kujutatud sinise, vakantsid kollase ning kristallisesed aatomid punase värviga. Joonisel A on näidatud emitter vakantsikihiga, joonisel B ilma vakantsikihita.

Joonisel 19 on kujutatud võrdlevaid elektrivälja jaotusi. Välja kvalitatiivne käitumine kummalgi pildil on väga sarnane. Maksimaalse elektrivälja tugevuse väärtuste erinevus jääb alla 10% mõlema väärtuse suhtes.



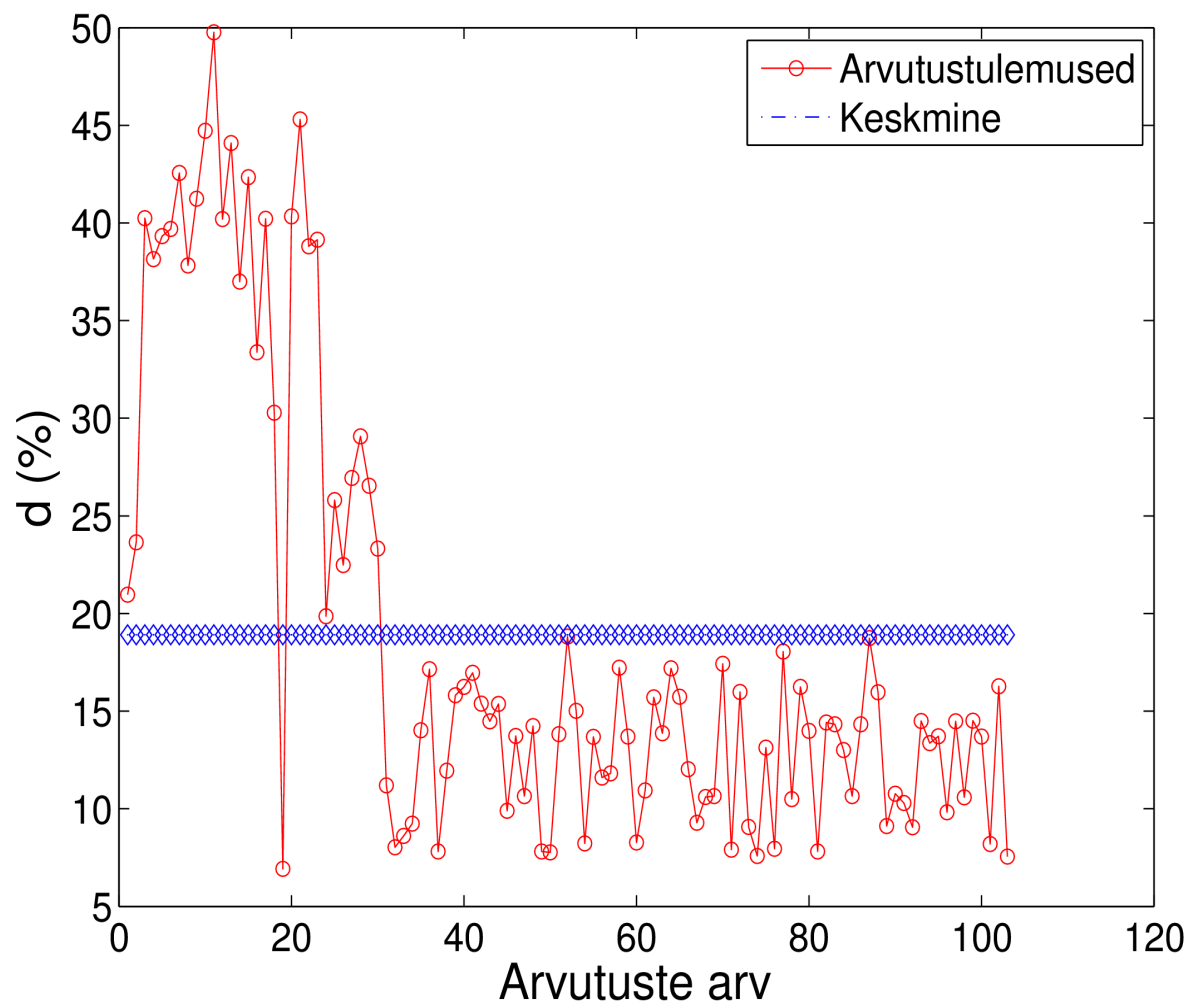
Joonis 19: Joonisel A on elektrivälja tugevuse jaotus pinnal, mis on ehitatud läbi pinna-aatomite koordinaatide, joonisel B elektrivälja tugevuse jaotus pinnal, mis on ehitatud 1 võrekonstandi võrra pinna kohal.

Vea määra hindamiseks on tehtud hulk järgnevaid arvutusi:

$$d = \frac{|E_{pind} - E_{vakants}|}{E_{pind}} \cdot 100 \quad (50)$$

E_{pind} on maksimaalne elektrivälja tugevus arvutatud pinnal, mis on läbi pinna-aatomite koordinaatide ehitatud (joonis 18B). $E_{vakants}$ on maksimaalne elektrivälja tugevus arvutatud pinnal, mis on läbi vakantsikihi koordinaatide ehitatud (joonis 18A). Saadav väärtus d näitab, kui mitu protsenti väärtusest E_{pind} võib tegelik pinna lähedane elektriväli erineda.

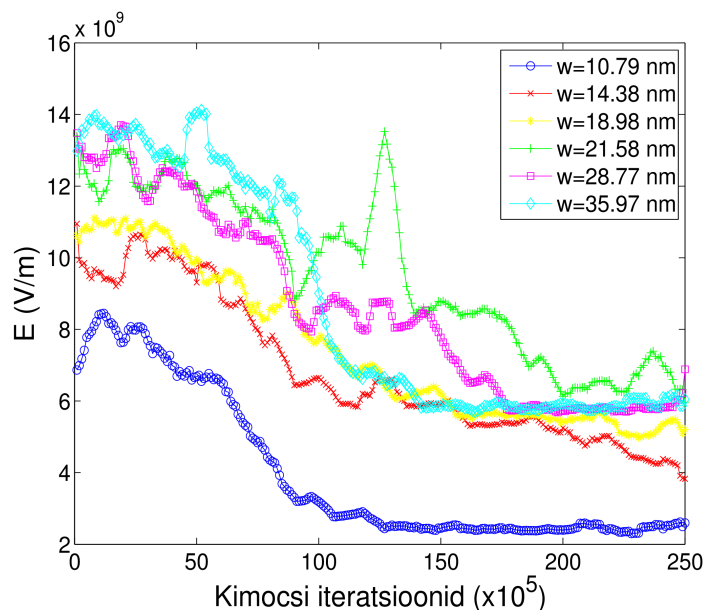
Joonis 20 demonstreerib, et keskmine ebatäpsusmäär 103 arvutuse pealt on ligikaudu 20 %.



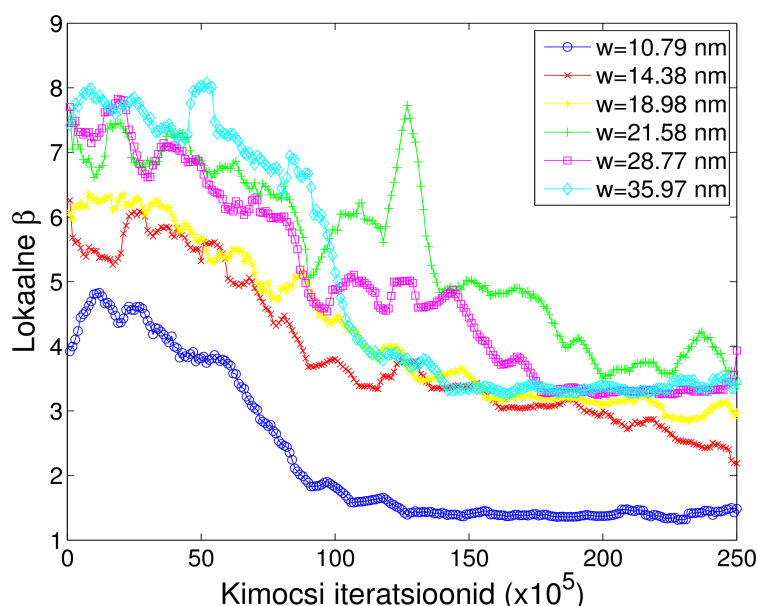
Joonis 20: Hinnang elektrivälja arvutuste ebatäpsusele.

4.4 Arvutustulemuste sõltuvus *Kimocsi* simulatsioonikasti suurusest

Joonise 21 graafikutel on kujutatud **maksimaalsed** arvutatud elektrivälja väärtused emitteri sama



Joonis 21: Elektrivälja suuruse maksimaalväärtused sõltuvalt tehtud Kimocsi iteratsioonide arvust. Legendis on ära märgitud Kimocsi simulatsioonikasti külje pikkus. Graafikud on silutud liikuva keskmisega loetavuse parandamiseks aknaga 10^6 iteratsiooni. Erinevad graafikud on tehtud legendil täpsustatud simulatsioonikasti külje pikkusega w .

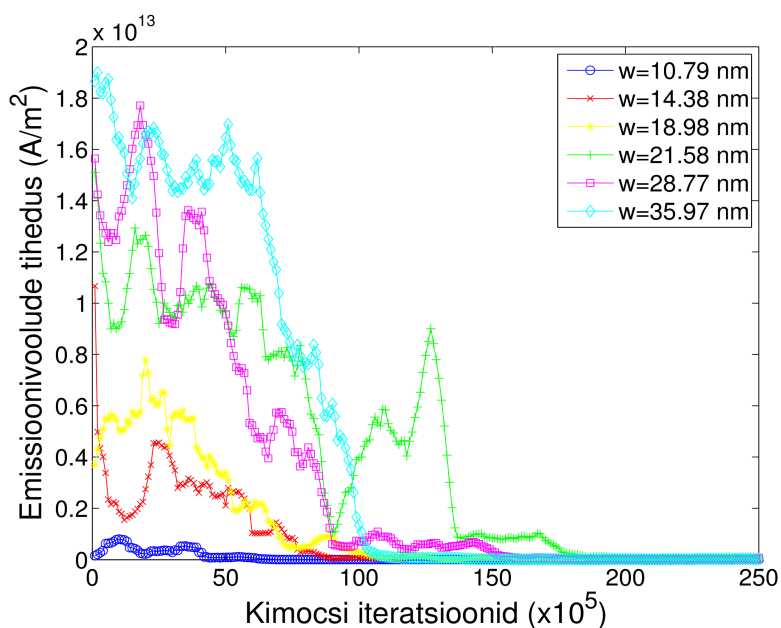


Joonis 22: Lokaalne väljavõimendustegur ehk elektrivälja lahendi ning rakendatud lokaalse elektrivälja 1750 MV/m suhe. Graafik silutud liikuva keskmisega silumissammuga 10^6 Kimocsi iteratsiooni.

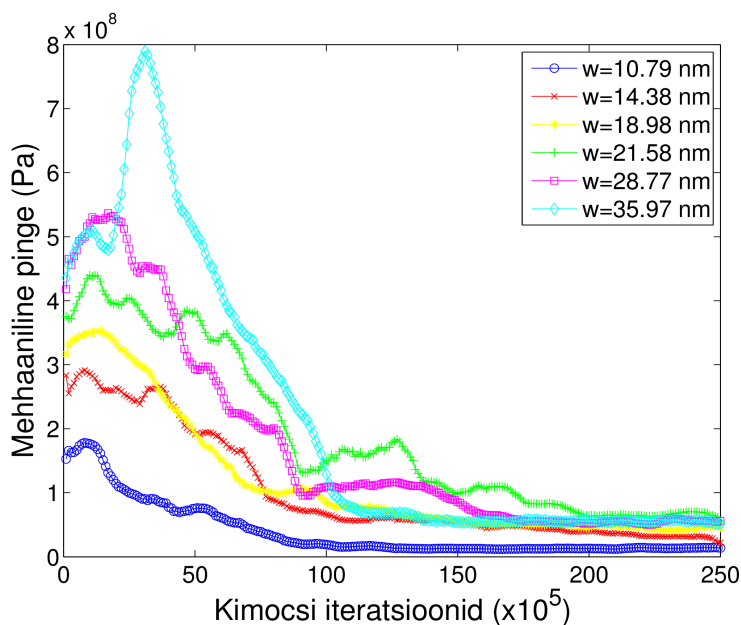
alggeomeetriaga, ent erineva simulatsioonikasti suurusega juhtude jaoks. Emitteri alggeomeetria on laiusena 3.60 nm ning kõrgusega 7.19 nm, näitena toodud joonisel 8A. Vasekristalli algtemperatuur on 1000K.

Graafikutelt saab välja lugeda korrelatsiooni arvutatava elektrivälja tugevuse ning *Kimocsi* simulatsioonikasti suuruse vahel. Selgelt võib simulatsioonikasti suuruse muutmine kaasa tuua kahekordseid erinevusi saadavates elektrivälja tugevuse väärtustes. Suuremate kastisuuruste korral muutub korrelatsioon elektrivälja tugevuse ning simulatsioonikasti suuruse vahel vähem märgatavaks, seetõttu on edasistes simulatsioonides võetud simulatsioonikasti küljepikkuseks 21.58 nm. Elektrivälja tugevuse lahend ning lokaalne väljavõimendus on siin konstandi erinevusega.

Joonisel 22 on näha lokaalne väljavõimendus, mille väärtus jääb alla 9. Kuna käsitletav mudel eeldab nanodefekti olekut suurema väljavõimendust tekitava geomeetrilise struktuuri otsas, ei ole see probleem. CLIC-i kiirendis rakendatud elektrivälja suhtes on siin rakendatud elektrivälja 17.5 korda suurem. Seega koos lokaalse väljavõimendusteguriga on läbilöögi tekkeks vajalik koguväljavõimendustegur simulatsiooni algstaadiumis piisavalt suur [7].



Joonis 23: Maksimaalse emissioonivoolude tiheduse sõltuvus Kimocsi iteratsioonidest. Erinevatel graafikutel on kujutatud Kimocsi simulatsioonikasti külje pikkust. **Graafikud on silutud liikuva keskmisega silumisaknaga 10^6 Kimocsi iteratsiooni.** Erinevad graafikud on tehtud legendil täpsustatud simulatsioonikasti külje pikkusega. Rakendatud elektrivälja tugevus on 1750 MV/m. Vasekristalli tausttemperatuur emissioonivoolude arvutamiseks on 293 K.



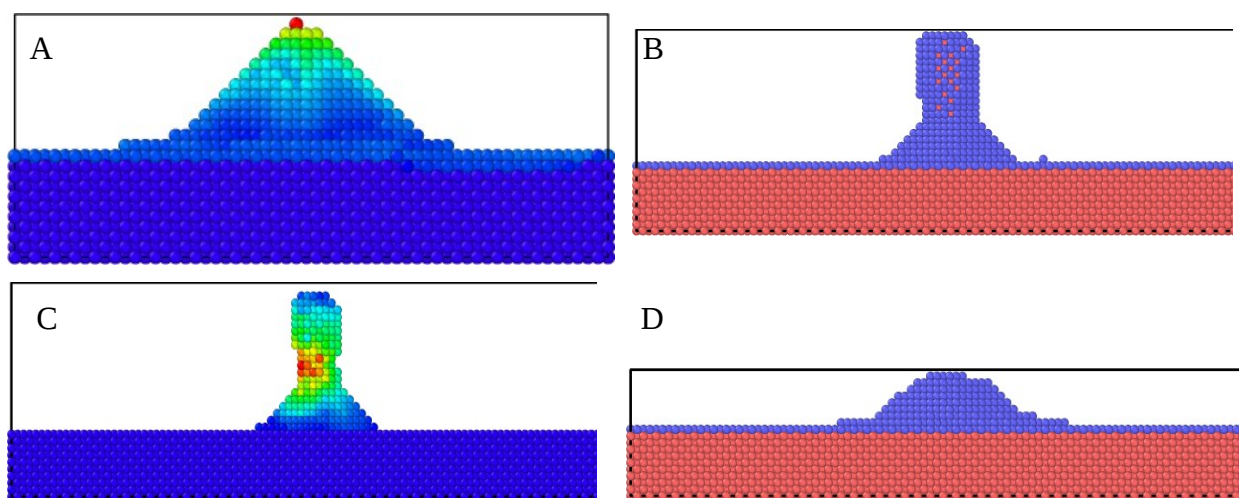
Joonis 24: Maksimaalse mehaanilise pinget sõltuvus Kimocsi iteratsioonidest. Graafik on silutud silumissammuga 10^6 iteratsiooni. Rakendatud lokaalne elektrivälja tugevus 1750 MV/m. Vasekristalli algtemperatuur on 293 K.

Kui läbilööki siis ei teki, vajub emitter kokku, elektrivälja väljavõimendus kahaneb ning sellega koos kahaneb tõenäosus läbilöögi tekkeks edaspidi. Samas ei ole läbilöögi teke välistatud, mida on näha graafikute fluktuatiivsest käitumisest, tuues näitena joonisel 22 väljavõimendusteguri hüppelise kasvu simulatsioonikasti küljepikkuse 21.58 nm juhul piirkonnas $100 \cdot 10^5 - 150 \cdot 10^5$ iteratsiooni.

Joonisel 23 on samas simulatsioonis arvutatud emissioonivoolude tiheduste puhul korrelatsioon Kimocsi simulatsioonikasti küljepikkusest selgemalt näha. Võrreldes elektrivälja graafikutega joonisel 21, langevad emissioonivoolude tiheduste väärtused joonisel 23 oluliselt kiiremini, näidates, et väljaemissioon on käsitletaval juhul domineerivaks elektronemissiooni efektiks. Vahemikus $100 \cdot 10^5 - 150 \cdot 10^5$ on emissioonivoolude puhul aga piik 1.5 korda väiksem kui emissioonivoolud simulatsiooni alguses. Joonisel 21 on elektrivälja piik samas piirkonnas kõrgem kui simulatsiooni alguses olevad elektrivälja tugevuse väärtused. Järelikult ei ole elektronide termoemissioon väljaemissiooni kõrval tühine, kuna vastasel juhul käituksid emissioonivoolude graafikud kvalitatiivselt sarnaselt elektrivälja tugevuse graafikutega, arvestades eksponentsiaalset sõltuvust, mis tuleneb valemist 4.

Joonisel 24 on näha selge mehaanilise pinge tõus esimese $10^6 - 2 \cdot 10^6$ Kimocsi iteratsiooni jooksul – suurema simulatsioonikasti küljepikkuse puhul $10^6 - 4 \cdot 10^6$ iteratsiooni jooksul. Seejärel langevad mehaanilised pinged seda järsemini, mida suurem on simulatsioonikasti külje pikkus. Graafikud langevad kvalitatiivselt hästi kokku elektrivälja tugevuste graafikutega joonisel 21 ning väljavõimendusteguri graafikutega joonisel 22, järelikult on pinnadefektis tekkivad mehaanilised pinged otseses seoses lokaalse väljavõimendusteguriga. See tähendab omakorda, et tekkivad mehaanilised pinged on otseses seoses emitteri geomeetrilise struktuuriga.

Siinsed graafikud on silutud liikuva keskmisega sama silumissammuga, nagu joonistel 21-23 näidatud. Sellest hoolimata on joonise 24 graafikud vähem fluktuatiivsed. Järelikult on pinnaatomite liikumisel elektriväljale mõnevõrra suurem mõju kui mehaanilistele pingetele vasekristallis või on kristallil seda mõju hajutav omadus. Teise variandina mõjutavad algoritmi tehtud lokaalsed vead elektrivälja arvutamisel mehaanilisi pingeid vähem.



Joonis 25:

A: Emitteri struktuur joonisel 21 toodud 21.58 nm simulatsioonikasti küljepikkusega graafiku 125×10^5 iteratsiooni ümbruses asuva piigi juures. Värviskaalal on elektrivälja tugevus.

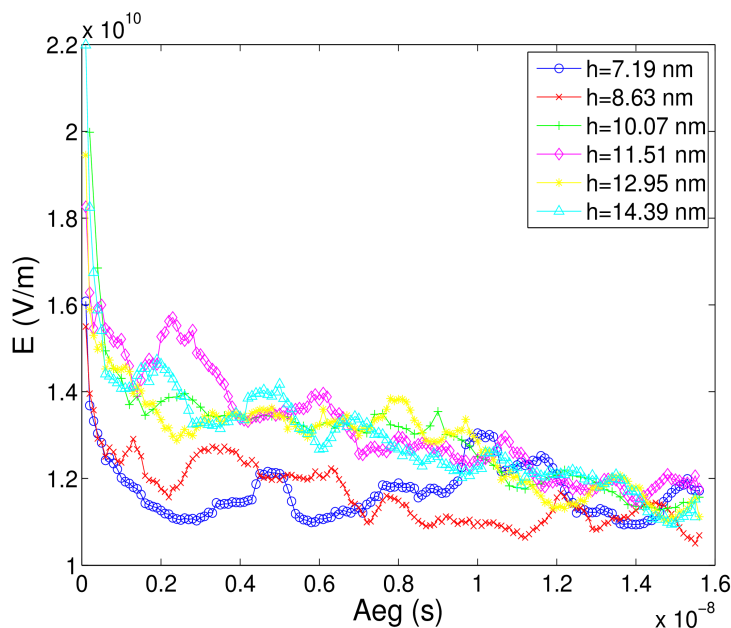
B: Emitteri struktuur joonisel 24 toodud 35.97 nm simulatsioonikasti küljepikkusega graafiku jaoks mehaanilise pinge piigi juures 31×10^5 iteratsiooni ümbruses.

C: Emitteris B nähtavad sisepinged on kujutatud värviskaalal. Pindmine aatomkiht on eemaldatud.

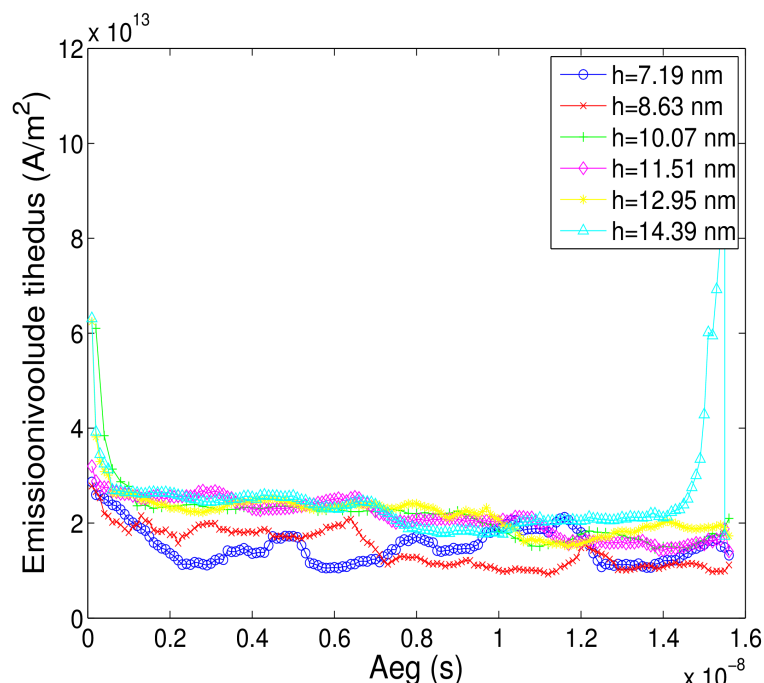
D: Joonistel B ning C kujutatud emitter 250×10^5 iteratsiooni järel.

Joonisel 25 on toodud pinna struktuurid joonistel 22, 23 ning 24 näidatud piikide kohal. Samuti on toodud pind pärast $250 \cdot 10^6$ Kimocsi iteratsiooni, näitamaks pinna relakseerumise lõppfaasi toodud graafikutel. Joonis 25A illustreerib, et üheainsa aatomi eendumine pinnast omab siinsel juhul märgatavat efekti elektrivälja tugevusele, viidates üksikule aatomile kujutatud struktuuri tipus, mille ümber on selgelt kõrgem elektriväli. Joonis 25B on näiteks emitteri kujust, mille puhul on näha suuri mehaanilise pingeid emitteris. Viimaste põhjuseks on emitteri mõnevõrra seenjas struktuur, mistõttu laia ülaosa ning pinna vahele jääb kitsam piirkond, kuhu koonduvad suuremad mehaanilised pinged, mille illustreerimiseks on toodud joonis 25C.

4.5 Arvutustulemuste sõltuvus emitteri algkõrgusest



Joonis 26: Elektrivälja ajaline sõltuvus emitteri erinevate algkõrguste puhul. Graafikud on silutud liikuva keskmisega silumissammuga 1 ns. Legendil toodud tegur h märgib emitteri algkõrgust.



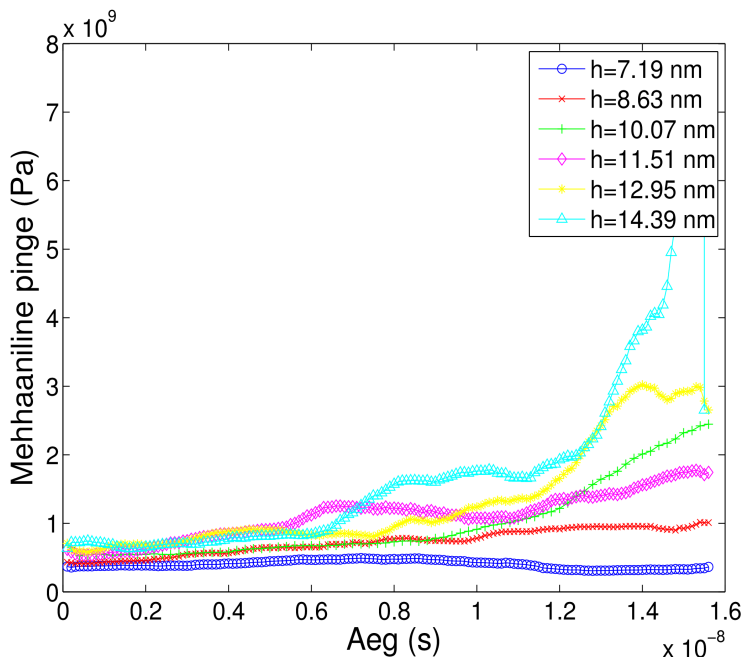
Joonis 27: Emissioonivoolude tihedus sõltuvalt ajast erinevate emitteri algkõrguste puhul. Graafikud on silutud liikuva keskmisega 1 ns. Legendil toodud tegur h märgib emitteri algkõrgust. Vasekristalli temperatuur 1000 K.

Joonisel 26 olevatel graafikutel on kujutatud maksimaalne saadud ajalise sõltuvusega elektrivälja väärtus erineva algkõrguse, ent sama laiusega emitterite jaoks. Seega siinsed tulemused annavad ettekujutuse emitteri algkõrguse ning -laiuse suhte mõjust elektriväljale. Joonise legendil kirjeldatud parameeter h tähistab risttahukalise emitteri algkõrgust. Emitteri alglaius on fikseeritud 3.60 nm juures ning algasukoht on tsentraliseeritud. Vasekristalli algtemperatuur on 1000K.

Graafikutelt saab välja lugeda, et kõrgema emitteri puhul on esinevad elektrivälja väärtused enamasti suuremad, mis on iseäranis selgelt avalduv, võrreldes graafikuid emitteri kõrgustega $h=7.19$ nm või $h=8.63$ nm muude toodud graafikutega. Esialgu langevad saadavad elektrivälja maksimaalväärtused ajas eksponentsiaalselt, seejärel käituvad graafikud fluktuatiivselt, kaldudes pigem kahanemise poole, ent mitte välistades tugevaid hüppeid elektrivälja maksimumväärtustes.

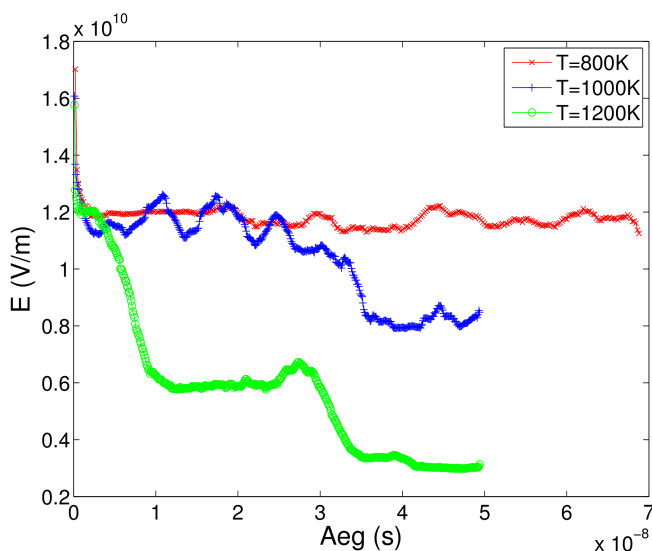
Jooniselt 27 on näha, et emissioonivoolude tihedused erinevate emitteri algkõrguste vahel käituvad kvalitatiivselt samamoodi. Kvantitatiivselt on kolme suurema kõrgusega emitteri puhul emissioonivoolude tihedused sarnased. Võrreldes emissioonivoolude tihedusi

graafikutel $h=14.39\text{ nm}$ ning $h=7.19\text{ nm}$, on esimese 14 ns jooksul arvuline erinevus nende vahel maksimaalselt kahekordne, korreleerudes nende kõrguste suhtega.



Joonis 28: Mehaanilise pinge sõltuvus ajast erinevate emitter algkõrguste puhul. Graafikud on silutud liikuva keskmisega silumissammuga 2 ns.

suurusjärgu võrra suurem vase monokristalli plastilisuspiirist (98 MPa) [51], seega on vasekristallis tekkivad deformatsioonid plastilised, mitte elastsed, ning seega on põhjendatud suurte deformatsioonide eeldus mudeli ülesehituses.



Joonis 29: Elektrivälja tugevuse sõltuvus ajast erineva tausttemperatuuriga emitterite puhul. Graafikud on silutud 2 ns silumisaknaga. Rakendatud elektriväli 1750 MV/m. Emitteri algkõrgus kõigil kolmel juhul 7.19 nm. Simulatsioonikasti külje pikkus on 21.58 nm.

Jooniselt 27 on näha, et emissioonivoolude tihedused erinevate emitter algkõrguste vahel käituvad kvalitatiivselt samamoodi. Kvantitatiivselt on kolme suurema kõrgusega emitteri puhul emissioonivoolude tihedused sarnased. Võrreldes emissioonivoolude tihedusi graafikutel $h=14.39\text{ nm}$ ning $h=7.19\text{ nm}$, on esimese 14 ns jooksul arvuline erinevus nende vahel maksimaalselt kahekordne, korreleerudes nende kõrguste suhtega.

Mehaaniline pinge emitteris tõuseb ajas **joonise 28** põhjal. Kõrgemas emitteris on näha kõrgemaid mehaanilisi pingeid. Siin kõige kõrgem esinev mehaaniline pinge on vähemalt

4.6 Arvutustulemuste sõltuvus vasekristalli temperatuurist

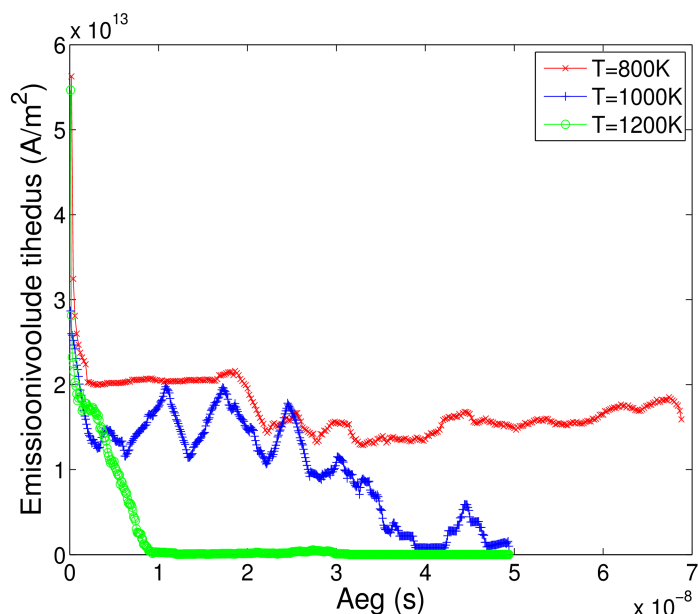
Vastavalt valemile 44 sõltub vasekristalli pinna muutumise kiirus temperatuurist. Simulatsioonides kasutati sama emitteri algkonfiguratsiooni laiusega 3.60 nm ning kõrgusega 7.19 nm, muutes vasekristalli tausttemperatuuri algtingimust.

Kõigi kolme temperatuuri juures on esialgsed elektriväljad väga sarnased, tingituna samast alggeomeetriast. Mõningane erinevus on tingitud sellest, et Femocsi tsükliks on enne LEM-arvutust

Kimocs. Seepärast pole algaasi arvutustulemused rangelt samade, vaid väga sarnaste pindade jaoks.

Joonise 29 graafikute võrdleval analüüsil on näha selgelt kiirem elektrivälja tugevuste langus kõrgemate emitteri algtemperatuuride puhul. Temperatuuri 800K juures on pind üsna statsionaarne ning elektrivälja tugevus muutub vähe. Temperatuuri 1000K juures on näha selget elektrivälja tugevuse langust ajas, temperatuuri 1200K juures aga selle väga kiiret langemist.

Joonisel 30 toodud emissioonivoolude tiheduste ajalised graafikud käituvad kvalitatiivselt sarnaselt joonise 29 elektrivälja tulemustega – kõrgemal temperatuuril langeb emissioonivoolude tihedus järsemalt. Ilmneb aga, et temperatuuril 800 K on emissioonivoolude tihedus stabiilse väärtusega. Nii emissioonivoolude tiheduste kui ka elektrivälja tugevuse graafikud näitavad, et pinna dünaamika ning sellest tingitud protsessid sõltuvad tugevalt temperatuurist.



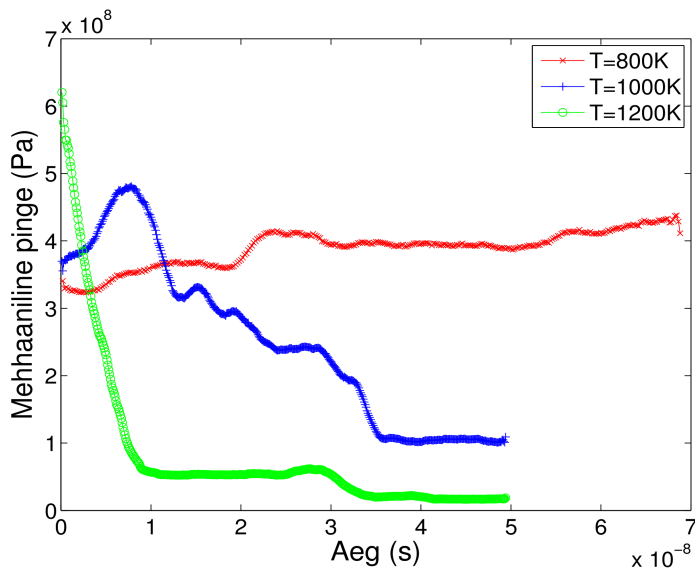
Joonis 30: Emissioonivoolude tiheduse sõltuvus ajast erinevate emitteritemperatuuride korral. Rakendatud elektriväli 1750 MV/m. Emitteri algkõrgus kõigil kolmel juhul 7.19 nm. Simulatsioonikasti külje pikkus 21.58 nm. Graafikud on silutud 2 ns silumisaknaga.

Emissioonivoolude tihedused on siinsel juhul mõõdetavad kümnetes teraamprites ruutmeetri kohta. Teoreetiliselt on läbilöögi protsessi mõjul tekkivad emissioonivoolud kuni sadade amprite suurusjärgus [3,7], arvestades küll plasma teket.

Joonis 16A illustreerib, et emissioonivoolud lähtuvad väikeselt, mõne võrekonstandi ruudu suuruselt pindalalt emitteri tipus. Joonise 30 maksimaalse emissioonivoolu tiheduse ning emissiooni pindala valiku 10 võrekonstandi ruudus puhul saab emissioonivoolu väärtusele järgmise hinnangu:

$$(3.597 \text{ nm})^2 \cdot 60 \cdot 10^{12} \frac{\text{A}}{\text{m}^2} = 0.000776 \text{ A} \quad (51)$$

Järelikult on plasma tekkel suur tähtsus läbilöögi tekkeks, võimendades tekkivat elektronemissiooni. Siinne mudel seda aga ei arvesta.



Joonis 31: Emitteris tekkiva mehaanilise pinget sõltuvus ajast erinevatel vasekristalli temperatuuridel. Graafikud silutud sammuga 2 ns.

Joonisel 31 toodud mehaaniliste pingete ajalise sõltuvuse graafikul on temperatuuride 1000 K ning 1200 K puhul näha sama temperatuurist sõltuvust nagu joonistel 29 ning 30. Temperatuuri 800 K puhul tundub, et pinnadünaamika on muutunud nii aeglaseks, et graafikul kujutatud 70 ns jooksul jääb emitter faasi, kus mehaanilised pinged tõusevad. Temperatuuril 1000K jääb see faas esimese 10 kujutatud ns sisse.

4.7 Edasised tööd

COMSOL ning selle kasutamiseks jooksutatav MATLAB on mõlemad kommertstarkvarad. Lisaks sellele on ebaoptimaalne süsteem, kus igas iteratsioonis kutsutakse MATLAB-i kaudu üles *TetGen*, millega luuakse võrk ning geomeetria, selleks, et see anda ette COMSOL-ile, mis hakkab esmalt võrgust geomeetria detekteerima, ehitades seejärel üles ülejäänud mudeli. Viimasele lisandub COMSOL-i suhteline aeglus.

Vabavaraliselt on olemas funktsioonikogumik *Deal II* [52], mis on C++ programmeerimiskeele baasil kirjutatud lõplike elementide meetodi kasutamiseks mõeldud tarkvara. *Deal II*-s on sisseehitatud meetodid võrgu loomiseks ning samuti arvutuste läbiviimiseks, andes samaaegselt kasutajale oluliselt rohkem kontrolli mudeli töötamise üle, kuna manuaalselt on vaja teha asju, mis on COMSOL-is automatiseeritud.

Femocsi koodi prototüüp on hetkel osaliselt ümber kirjutatud *Deal II* platvormile. Käesoleva töö autor on kirjutanud selleks Laplace võrrandi lahendamise algoritmi, koostöös Mihkel Veskega Helsingi ülikoolist, kes on selle kokku pannud samuti *TetGen*-is implementeeritud võrgu loomise meetodiga ning *Kimocsi*ga, eesmärgiga kombineerida seda HELMOD-iga. Seega on elektrivälja arvutamine arbitraarse geomeetria jaoks nüüd võimalik ka *Deal II*-s.

Kuna *Deal II* baasil kirjutatud koodi on lihtne optimeerida, kulub ühe arvutusiteratsiooni tegemiseks *Deal II*-s mõni sekund. COMSOL-i ning MATLAB-iga kirjutatud algoritmi puhul pole võimalik nii suurt arvutuskirust käsitletava mudeli puhul saavutada. Teisalt läheb ka lihtsamate mudelite ehitamisega *Deal II*-s oluliselt kauem aega, seega *Deal II* mudel on arendamisjärgus.

4.8 Kokkuvõte

Käesoleva töö raames on kirjutatud algoritm Femocs, mis kasutab COMSOL MultiPhysics-is implementeeritud GTF-mudelit ning atomistliku pinnadefekti dünaamika mudelit *Kimocs*, arvutamaks vasepinna nanoddefekti mudelis elektrivälju, emissioonivoole, vasekristallis tekkivaid pingeid ning emissioonivoole, et uurida nende arengut ajas, sõltuvalt pinna muutumisest. Algoritm on ehitatud lihtsalt kohandatavaks, ning sellesse on implementeeritud prototüüpne pinna rekonstrueerimise algoritm.

Pinna rekonstrueerimisalgoritm on välja töötatud kahe meetodi katsetuste tulemusena, millest viimane töötab piisavalt hästi, et seda kasutada esialgsetes arvutustes. Tulemuste täpsus on küllaldane, et analüüsida emissioonivoolude, vasekristalli mehaaniliste pingete ning emitteri kohal oleva elektrivälja kvalitatiivset käitumist. Elektrivälja arvutustulemuste hinnanguliseks ebatäpsuse määraks pinna rekonstrueerimismeetodi ebatäiuslikkusest tingituna on ligikaudu 20 %. Võrdluseks HELMOD-iga on samadel pindadel saadud elektrivälja jaotused samad, käesoleva algoritmi arvutatud elektrivälja väärtused on aga suuremad.

HELMOD-i elektrivälja tulemustega võrreldes on saadud tulemused vähemalt sama täpsed. Käesolevas töös saadud algoritmiga saadud tulemused olid kõrgemad kui HELMOD-iga saadud tulemused, mis on ootuspärane tulemus.

Simuleeritud emitterid saavutasid eeldusi arvesse võttes lokaalse väljavõimendusteguri väärtuse, mis on samas suurusjärgus kirjanduses mainitud läbilöögi tekkeks vajaliku ligikaudu 100-kordse väljavõimendusteguriga. Mudelis arvutatud elektrivälja tugevused emitteri kohal käitusid kirjanduses mainitule vastavalt: kõrgema emitteri puhul oli emitteri kohal oleva elektrivälja tugevus suurem. Lühemad emitterid vajusid pinnale laiali, tingides algul eksponentsiaalse elektrivälja kahanemise, mis seejärel jäi mingi väärtuse lähedale, tehes siiski märkimisväärsed fluktuatsioone. Kõrgemate emitterite puhul oli näha algul elektrivälja tugevuse eksponentsiaalset kahanemist, mis läks üle lineaarseks kahanemiseks.

Emissioonivoolude tihedused olid kõrgemate emitterite puhul kõrgemad. Emissioonivoolude tihedused langesid esialgu eksponentsiaalselt, seejärel püsisid enam-vähem konstantsena.

Elektrivälja mõjul tekkisid vasekristallis mehaanilised pinged suurusjärgus 10^9 Pa. Kõrgemate emitterite puhul tekkisid oluliselt suuremad mehaanilised pinged. Tekkivad pinged ületasid vase monokristalli plastilisuspiiri, mistõttu esineb emitteris plastiline deformatsioon.

5 Viited

- [1] CERN, "CLIC collaboration homepage: CLIC in a nutshell" <http://clic-study.web.cern.ch/content/clic-nutshell> (2016).
- [2] Dominik Dannheim, Philippe Lebrun, Lucie Linssen, Daniel Schulte, Frank Simon, Steinar Stapnes, Nobukazu Toge, Harry Weerts, James Wells, "CLIC e+e- Linear Collider Studies", lk 1-15, (2012).
- [3] M. Aicheler, P. Burrows, M. Draper, T. Garvey, P. Lebrun, K. Peach, N. Phinney, H. Schmickler, D. Schulte ja N. Toge, "A Multi-TeV linear collider based on CLIC technology: CLIC Conceptual Design Report", CERN-2012-007, lk 22-26, (2012).
- [4] C. Z. Antoine, F. Peauger, F. Le Pimpec, "Erratum to: Electromigration occurrences and its effects on metallic surfaces submitted to high electromagnetic field: A novel approach to breakdown in accelerators" **670**, 79-94 (2012).
- [5] T. Higo, Progress of X-band accelerating structures. Linac **10**, FR104 (2011).
- [6] Grudiev, A., Calatroni, S. & Wuensch, W. "New local field quantity describing the high gradient limit of accelerating structures." Phys. Rev. ST Accel. Beams **12**, 102001 (2009).
- [7] G. A. Mesyats, "Pulsed power", lk 29-53, (2005)
- [8] E. Hourdakis, G. W. Bryant, ja N. M. Zimmerman, "Electrical breakdown in the microscale: Testing the standard theory", Journal of Applied Physics **100**, 123306 (2006)
- [9] Kristjan Eimre, Stefan Parviainen, Alvo Aabloo, Flyura Djurabekova, Vahur Zadin, "Application of the general thermal field model to simulate the behaviour of nanoscale Cu field emitters", Journal Of Applied Physics **118**, 033303 (2015)
- [10] G.A. Izquierdo, SEM analysis of HDS accelerating structures from recent 30 GHz tests at CTF3, in: Proceedings of the CLIC Meeting, 2007, [http:// clic-meeting.web.cern.ch/clic-meeting/2007/01_12ga.pdf](http://clic-meeting.web.cern.ch/clic-meeting/2007/01_12ga.pdf).
- [11] M. Kildemo, S. Calatroni, ja M. Taborelli, Phys. Rev. ST Accel. Beams **7**, 092003 (2004).
- [12] M. Kildemo, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A **530**, 596 (2004).
- [13] A.S. Pohjonen, F. Djurabekova, K. Nordlund, A. Kuronen, S.P. Fitzgerald, J. Appl. Phys. **110** (2011) 023509.
- [14] S. Parviainen, F. Djurabekova, H. Timko, K. Nordlund, "Electronic processes in molecular dynamics simulations of nanoscale metal tips under electric fields", Comp. Mat. Sci. **50** (2011) 2075–2079. doi:10.1016/j.commatsci.2011.02.010.
- [15] V. Zadin, A. Pohjonen, A. Aabloo, K. Nordlund ja F. Djurabekova, "Electrostatic-elastoplastic simulations of copper surface under high electric fields", Physical Review Special Topics -

- [16] S. Vigonski, F. Djurabekova, M. Veske, A. Aabloo, V. Zadin, “Molecular dynamics simulations of near-surface Fe precipitates in Cu under high electric fields”, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **23** (2015) 025009. doi:10.1088/0965-0393/23/2/025009
- [17] V. Zadin, A. Krasheninnikov, F. Djurabekova, K. Nordlund, “Simulations of electromechanical shape transformations of Au nanoparticles”, *Physica Status Solidi B.* **252** (2014) 144–148.
- [18] M. Veske, S. Parviainen, V. Zadin, A. Aabloo, F. Djurabekova, Electrodynamics—molecular dynamics simulations of the stability of Cu nanotips under high electric field, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **49** (2016) 215301. doi:10.1088/0022-3727/49/21/215301.
- [19] H. Yanagisawa, V. Zadin, C. Hafner, A. Aabloo, D.E. Kim, L. Gallmann, M.F. Kling, F. Djurabekova, J. Oesterwalder, W. Wuensch, “Laser-induced asymmetric faceting and growth of nano-protrusion on a tungsten tip”, *Nano Letters.* (n.d.) Esitatud avaldamiseks
- [20] A.S. Pohjonen, F. Djurabekova, A. Kuronen, S.P. Fitzgerald, K. Nordlund, Analytical model of dislocation nucleation on a near-surface void under tensile surface stress, *Philos. Mag.* **92** (2012) 3994–4010. doi:10.1080/14786435.2012.700415.
- [21] F. Djurabekova, S. Parviainen, A. Pohjonen, ja K. Nordlund, “Atomistic modeling of metal surfaces under electric fields: Direct coupling of electric fields to a molecular dynamics algorithm”, *Phys. Rev. E* **83**, 026704, (2011); URL: <http://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.83.026704>
- [22] COMSOL MultiPhysics 4.4 Reference Manual (2013)
- [23] D. Halliday, R. Resnick, J. Walker, *Fundamentals of Physics.* John Wiley & Sons, 9th ed., 2013.
- [24] K. L. Jensen, *Journal of Applied Physics* **102**, 024911 (2007), <http://dx.doi.org/10.1063/1.2752122>
- [25] R. G. Forbes ja J. H. Deane, “Reformulation of the standard theory of Fowler–Nordheim tunnelling and cold field electron emission”, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **463**, 2907–2927 (2007).
- [26] R. G. Forbes, “Simple good approximations for the special elliptic functions in standard Fowler-Nordheim tunneling theory for a Schottky-Nordheim barrier”, *Applied physics letters* **89**, 113122 (2006).
- [27] K. L. Jensen, Y. Y. Lau, D. W. Feldman, ja P. G. O’Shea, “Electron emission contributions to dark current and its relation to microscopic field enhancement and heating in accelerator structures”, *Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams* **11**, 81001 (2008).
- [28] E. L. Murphy ja R. H. Good, *Phys. Rev.* **102**, 1464 (1956).
- [29] C. Herring ja M. H. Nichols, “Thermionic Emission”, *Reviews of Modern Physics* **21**, 185–270 (1949).

- [30] M. E. Kiziroglou, X. Li, A. A. Zhukov, P. A. J. De Groot, ja C. H. De Groot, “Thermionic field emission at electrodeposited Ni–Si Schottky barriers”, *Solid-State Electronics* **52**, 1032–1038 (2008)
- [31] F. M. Charbonnier, R. W. Strayer, L. W. Swanson, ja E. E. Martin, “Nottingham Effect In Field and T-F Emission: Heating and Cooling Domains, and Inversion Temperature”, Volume 13, Number 13, *Physical Review Letters* **28** (1964)
- [32] H. Karik, K. Truus, “Elementide keemia”, 2003
- [33] P. Kranjec, L. Ruby, *J. Vac. Sci. Technol.* **4**, 94 (1967); <http://dx.doi.org/10.1116/1.1492528>
- [34] A. E. Yarimbiyik, H. A. Schafft, R. A. Allen, M. E. Zaghloul, D. L. Blackburn, *Microelectron. Reliab.* **46**, 1050 (2006), <http://dx.doi.org/10.1016/j.microrel.2005.09.004>
- [35] D.J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 3rd edition, Addison Wesley, Upper Saddle River, N.J, 1999
- [36] A.F. Bower, *Applied Mechanics of Solids*, CRC Press, 2009.
- [37] COMSOL MultiPhysics 4.4 Structural Mechanics Module User’s Guide (2013)
- [38] N.S. Ottosen, M. Ristinmaa, *The Mechanics of Constitutive Modeling*, Elsevier, 2005
- [39] COMSOL MultiPhysics 4.4 Material Library (2013)
- [40] MATLAB homepage, <http://www.mathworks.com>
- [41] V.Jansson, E.Baibuz ja F. Djurabekova, “Long-term stability of Cu surface nanotips”, *Nanotechnology* **27** 265708, (2016), <http://arxiv.org/pdf/1508.06870.pdf>
- [42] TetGen homepage, <http://wias-berlin.de/software/tetgen/>
- [43] N. Castin, M.I. Pascuet ja L. Malerba 2011 *The Journal of chemical physics* **135** 064502
- [44] M.S. Stave D.E. Sanders, T.J. Raeker ja A.E. DePristo 1990 *The Journal of Chemical Physics* **93** 4413–4426 URL <http://dx.doi.org/10.1063/1.458724>
- [45] F. Granberg, S. Parviainen, F.Djurabekova ja K. Nordlund 2014 *Journal of Applied Physics* **115** 213518
- [46] Wheeler P. Davey, “Precision Measurements of the Lattice Constants of Twelve Common Metals”, *Phys. Rev.* **25**, 753, (1925)
- [47] J. Kirs, G. Arjassov, “Sissejuhatus Lõplike Elementide Meetodisse I”, TTÜ kirjastus, 1999
- [48] Ovito visualization software homepage, <http://ovito.org/>
- [49] Iso2mesh: A 3D surface and volumetric mesh generator for MATLAB/Octave, <http://iso2mesh.sourceforge.net/cgi-bin/index.cgi>
- [50] TetGen manual, <http://wias-berlin.de/software/tetgen/1.5/doc/manual/manual.pdf>
- [51] Y. Liu, B. Wang, M. Yoshino, S. Roy, H. Lu, R. Komanduri, “Combined numerical simulation

and nanoindentation for determining mechanical properties of single crystal copper at mesoscale”,
J. Mech. Phys. Solids, **53** (2005) 2718

[52] The deal.II Finite element Library, URL: dealii.org

6 Tänuõnad

Esmalt soovin tänada oma juhendajat Vahur Zadinit. Olen samuti tänulik Ville Janssonile, kellelt pärines Kimocs. Soovin ka tänada Simon Vigonskit nõuannete ning selgust toonud arutelude eest.

Peale nende soovin tänada Intelligentsete Materjalide ja Süsteemide labori lahket ning sõbralikku kollektiivi ja labori juhatajat Alvo Aablood hea töökeskkonna eest. Samuti soovin tänada Tartu Ülikooli füüsika õppimise võimaluse eest.

Lõpuks, soovin tänada oma perekonda ning sõpru, kes mind õpingute ajal toetasid.

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja lõputöö üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, Robert Aare (sünnikuupäev 31.03.1994),

1. annan Tartu Ülikoolile tasuta loa (lihtlitsentsi) enda loodud teose:

„Kõrges elektriväljas relakseeruva Cu atomistliku nanoemitteri modelleerimine kineetilise Monte Carlo ning lõplike elementide meetoditega”,

mille juhendaja on PhD Vahur Zadin,

1.1. reprodutseerimiseks säilitamise ja üldsusele kättesaadavaks tegemise eesmärgil, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace-is lisamise eesmärgil kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni;

1.2. üldsusele kättesaadavaks tegemiseks Tartu Ülikooli veebikeskkonna kaudu, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace'i kaudu kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni.

2. olen teadlik, et punktis 1 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.

3. kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei rikuta teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse seadusest tulenevaid õigusi.

Tartus, 26.05.2016